

Numerische Untersuchung der Stoßrohrströmung im Hochenthalpiekanal Göttingen

Von der Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Maschinenbau der
Universität Duisburg-Essen
zur Erlangung des akademischen Grades

DOKTOR-INGENIEUR

genehmigte Dissertation

von

Bodo Reimann
aus
Stadtoldendorf

Referent: Prof. Dr.-Ing. Dieter Hänel

Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Schröder

Tag der mündlichen Prüfung: 30. September 2009

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Zeit als Mitarbeiter des Instituts für Aerodynamik und Strömungstechnik des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt e.V. in Braunschweig und Göttingen.

Der Großteil der Ergebnisse stammt aus meiner Zeit in Göttingen in den Jahren 2000 bis 2005, fertiggestellt wurde die Arbeit während meiner Tätigkeit in Braunschweig ab 2005.

Bedanken möchte ich mich bei den beiden Leitern der Abteilung Raumfahrzeuge in Göttingen und Braunschweig, Herrn Dr.-Ing. Klaus Hannemann für die Ermöglichung der Arbeit und bei Herrn Dr.-Ing. José M. A. Longo für den Freiraum die Arbeit in Braunschweig fertigstellen zu können.

Ebenfalls bedanken möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Dieter Hänel, der die Arbeit über all die Jahre seitens der Universität Duisburg-Essen betreut hat sowie bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Schröder von der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen für die Bereitschaft zur Übernahme des Korreferats.

Mein besonderer Dank gilt meinen Kolleginnen und Kollegen der Abteilung Raumfahrzeuge. Insbesondere Herrn Dr. rer. nat. Volker Hannemann für seine Unterstützung und die allzeitige Diskussionsbereitschaft auch über diese Arbeit hinaus. Für die wissenschaftlichen Diskussionen während der Entstehung dieser Arbeit bedanke ich mich bei Herrn Dr. rer. nat. Jan Martinez Schramm und Herrn Dr.-Ing. Andreas Mack.

Zuletzt möchte ich mich bei meiner Familie bedanken. Ihre Geduld und ihr Verständnis waren mir eine große Hilfe. Danke.

Bodo Reimann
Braunschweig, November 2009

Stoßrohr, Hochenthalpieströmung, HEG, Stoß-Grenzschicht Wechselwirkung, Treibgaskontamination, lokale Netzadaption, numerische Strömungssimulation, TAU-Code

Bodo Reimann

Numerische Untersuchung der Stoßrohrströmung im Hochenthalpiekanal Göttingen

Bei sehr hohen Fluggeschwindigkeiten spielen neben stömungsmechanischen auch thermodynamische Aspekte eine entscheidende Rolle. Charakteristisch für diese hochenthalpen Strömungen ist das Auftreten chemischer Reaktionen des Gases. Eine Anlage zur Untersuchung solcher Strömungen, wie sie beispielsweise beim Eintritt von Raumfahrzeugen in Planetenatmosphären auftreten, ist der Hochenthalpiekanal Göttingen (HEG). Bei dem flugkolbengetriebenen Stoßwellenrohr handelt es sich um eine Anlage mit einer Meßzeit von nur wenigen Millisekunden pro Versuch. Ein Mechanismus, der diese Testzeit dramatisch verkürzt, ist die vorzeitige Treibgasankunft in der Meßstrecke aufgrund einer Stoß-Grenzschicht Wechselwirkung im Stoßrohr. Die vorliegende Arbeit untersucht numerisch die Wirkungsweise einer Vorrichtung, des sogenannten Treibgasabscheiders, zur Verzögerung der Treibgaskontamination. Das verwendete numerische Verfahren ist der DLR TAU-Code. Zunächst wird eine Erweiterung des Verfahrens zur Simulation von Gasen im thermochemischen Gleichgewicht diskutiert und validiert. Es wird gezeigt, daß die lokale Netzadaption in der Lage ist die auftretenden instationären stömungsphysikalischen Phänomene wie Stoßwellen und Kontaktunstetigkeiten mit hoher räumlicher Genauigkeit aufzulösen. Die Anwendung des Verfahrens auf die HEG Stoßrohrströmung zeigt eine Wirkungsweise des Teibgasabscheiders, die auf einem Zurückdrängen des Treibgases beruht.

Shock tube, high enthalpy flow, HEG, shock-boundary layer interaction, driver gas contamination, local grid refinement, computational fluid dynamics, TAU-code

Bodo Reimann

Numerical Simulation of the Shock Tube Flow in the High Enthalpy Shock Tunnel Göttingen

At very high flight velocities both aerodynamic and thermodynamic aspects play an important role. Characteristic of these high enthalpy flows is the occurrence of chemical reactions within the gas. The High Enthalpy Shock Tunnel Göttingen (HEG) is a facility to investigate such flows, that occur for example, during the entry of space vehicles into planetary atmospheres. The free piston-driven shock tunnel is a short-term facility with a measurement time of only a few milliseconds per run. A mechanism which can decrease the test time dramatically is premature driver gas arrival in the test section due to shock-boundary layer interactions in the shock tube. The present work numerically investigates the operation of a device, so-called driver gas separator or sleeve, to delay such contamination of the test gas. The numerical tool employed is the DLR TAU-code. First, an extension of the code to simulate gases in thermochemical equilibrium is discussed and validated. It is shown that the local grid refinement is capable to capture the unsteady flow phenomena that occur, such as shock waves and contact discontinuities, with high spatial accuracy. The application of the code to the HEG shock tunnel flow shows the effect of the sleeve to be a reversal of the direction of the driver gas motion.

Inhalt

Abbildungen	iii
Tabellen	v
Symbole	vii
1 Einleitung	1
1.1 Hochenthalpiekanal Göttingen	1
1.2 Strömung im Stoßwellenrohr	3
1.3 Zielsetzung	8
2 Physikalische Modellierung	9
2.1 Gleichgewichtszustand reagierender Gasgemische	10
2.1.1 Struktur und Gleichgewichtsbedingung	10
2.1.2 Numerische Berechnung der Zusammensetzung	12
2.1.3 Zustandsgrößen und Zustandssummen	15
2.2 Berechnung der Transportgrößen	22
2.2.1 Viskosität	22
2.2.2 Wärmeleitung	24
2.3 Bilineare Interpolation	25
3 Numerisches Verfahren	31
3.1 Grundgleichungen	31
3.2 Turbulenzmodellierung	35
3.3 Räumliche und zeitliche Diskretisierung	37
3.3.1 Räumliche Diskretisierung	37
3.3.2 Diskretisierung der konvektiven Flüsse	37
3.3.3 Diskretisierung der dissipativen Flüsse	40
3.3.4 Zeitintegration	41
3.4 Randbedingungen	42
3.4.1 Reibungsfreie Wandrandbedingungen	42
3.4.2 Reibungsbehaftete Wandrandbedingungen	43
3.4.3 Ein- und Auströmrandbedingung	43
3.4.4 Einstromrandbedingung für Stoßrohrströmung	44
3.4.5 Symmetrierandbedingung	46
3.5 Netzadaption	46
3.6 Parallelisierung	47

4	Validierung	49
4.1	Gleichgewichtsmodellierung	49
4.2	Ideales Stoßwellenrohr	52
4.3	Stoß-Grenzflächen Interaktion	55
5	Stoßrohrströmung im Hochenthalpiekanal Göttingen	63
5.1	Rechengebiet und -netz	63
5.2	Strömung am Einströmrand	63
5.3	Konvergenz	68
5.4	Diskussion der Ergebnisse der TAU Simulation	69
6	Zusammenfassung und Ausblick	81
	Literatur	83
	Anhang	89
A	Stoffkonstanten	91
A.1	Konstanten zur Berechnung thermodynamischer Größen	91
A.2	Konstanten zur Berechnung der Viskosität	92
A.3	Konstanten zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit	93
B	Bildliche Darstellung	95
B.1	Schlierenbilder	95
C	Strömung im Spalt des Treibgasabscheiders	97

Abbildungen

1.1	Prinzipiskizze des Göttinger Hochenthalpiekanals	1
1.2	Fotografische Abbildung des Göttinger Hochenthalpiekanals	2
1.3	Weg-Zeit Diagramm eines kolbengetriebenen Stoßwellenrohres	3
1.4	Schematische Darstellung des Prozesses der Treibgaskontamination im HEG	4
1.5	Detailansicht des Stoßbrohrendes im HEG	6
1.6	Gemessene Druckverläufe im HEG ohne Heliumabscheider	7
1.7	Gemessene Druckverläufe im HEG mit Heliumabscheider	7
2.1	Gleichgewichtszusammensetzung eines Luftgemisches ($0,001 \text{ kg/m}^3$)	16
2.2	Gleichgewichtszusammensetzung eines Luftgemisches (10 kg/m^3)	16
2.3	Dimensionslose Enthalpie der Spezies	19
2.4	Dimensionslose Entropie der Spezies	21
2.5	Dimensionslose Wärmekapazität der Spezies bei konstantem Druck	22
2.6	Viskosität der einzelnen Spezies	23
2.7	Viskosität des Gemisches	24
2.8	Wärmeleitfähigkeit der einzelnen Spezies	25
2.9	Wärmeleitfähigkeit des Gemisches	26
2.10	Interpolationsflächen der Temperatur und des Drucks	28
2.11	Interpolationsflächen der Wärmekapazität und des Massenanteils von NO	29
3.1	Prinzipielle Darstellung des primären und dualen Rechnernetzes	37
3.2	Grenzschicht hinter einem sich bewegenden Stoß	43
3.3	Verfeinerung dreieckiger Elemente	46
3.4	Beispielhafte Verfeinerung eines hybriden Rechnernetzes	47
4.1	Rechnernetze für Zylinder- und Kugelumströmung	49
4.2	Strömungsfeld für Zylinder- und Kugelumströmung	50
4.3	Strömungsgrößen entlang der Staustromline vor dem Zylinder	51
4.4	Strömungsgrößen entlang der Staustromline vor der Kugel	51
4.5	Zustände im idealen Stoßwellenrohr	52
4.6	Strömungszustand im idealen Stoßwellenrohr mit Luft als Treibgas	53
4.7	Strömungszustand im idealen Stoßwellenrohr mit Helium als Treibgas	54
4.8	Weg-Zeit Diagramm für das ideale Stoßwellenrohr	55
4.9	Rechengebiet für die Stoß-Blasen Wechselwirkung	56
4.10	Rechnernetze für die Stoß-Grenzflächen Simulation	57
4.11	Instationäre Netzadaption	58
4.12	Simulation der Heliumblase	59

4.13	Simulation der Heliumblase mit einer Verunreinigung von 68% Luft	60
4.14	Simulation der Heliumblase unter Berücksichtigung einer Zeitverzögerung	60
4.15	Simulation der Difluorchlormethanblase	61
5.1	Ausgangsnetz zur Berechnung der Strömung im HEG	63
5.2	Weg-Zeit Diagramm der HEG Strömung berechnet mit L1d	64
5.3	Strömungsgrößen auf dem Einströmrand für die HEG Simulation	65
5.4	Grenzschichtprofil am Einströmrand für die HEG Simulation	66
5.5	Dimensionsloses Geschwindigkeitsprofil der Stoßrohrgrenzschicht im HEG	67
5.6	Konvergenzuntersuchung	68
5.7	Weg-Zeit Diagramm der HEG Strömung berechnet mit TAU	69
5.8	Einfluß der Viskosität auf die Stoßrohrströmung im HEG	70
5.9	Stoßrohrströmung im HEG (Teil 1)	71
5.10	Stoßrohrströmung im HEG (Teil 2)	72
5.11	Geschwindigkeitsverteilung im Stoßrohr des HEG	73
5.12	Treibgasverteilung im Stoßrohr des HEG (Teil 1)	74
5.13	Treibgasverteilung im Stoßrohr des HEG (Teil 2)	75
5.14	Weg-Zeit Diagramm der Strömung im Spalt des Heliumabscheiders	76
5.15	Strömung im vorderen Teil des Heliumabscheiders	77
5.16	Druck auf der Vorderkante des Heliumabscheiders	78
5.17	Fotografische Abbildung des Heliumabscheiders	78
5.18	Zeitliche Entwicklung des Reservoirdrucks	79
C.1	Strömung im Spalt des Heliumabscheiders (Teil 1)	97
C.2	Strömung im Spalt des Heliumabscheiders (Teil 2)	98
C.3	Strömung im Spalt des Heliumabscheiders (Teil 3)	99
C.4	Strömung im Spalt des Heliumabscheiders (Teil 4)	100

Tabellen

1.1	Reservoir- und Anströmbedingung für HEG Versuchsbedingung I	2
4.1	Testfalldefinition für Zylinder- und Kugelumströmung	50
4.2	Testfalldefinition für die Simulation des idealen Stoßwellenrohres	52
4.3	Testfalldefinition für die Simulation der Stoß-Blasen Wechselwirkung	56
5.1	Einströmbedingungen am Grenzschichtrand für die HEG Simulation	67
A.1	Charakteristische Größen für molekulare Spezies	91
A.2	Charakteristische Größen für atomare Spezies	91
A.3	Stoffkonstanten zur Berechnung der Viskosität der Spezies für den oberen Temperaturbereich	92
A.4	Stoffkonstanten zur Berechnung der Viskosität der Spezies für den unteren Temperaturbereich	92
A.5	Stoffkonstanten zur Berechnung der Viskosität nach Sutherland für den ge- samten Temperaturbereich	92
A.6	Stoffkonstanten zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit der Spezies für den oberen Temperaturbereich	93
A.7	Stoffkonstanten zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit der Spezies für den unteren Temperaturbereich	93

Symbole

Lateinische Symbole

A^μ, B^μ, C^μ	Stoffkonstanten der Viskosität
$A^\kappa, B^\kappa, C^\kappa, D^\kappa$	Stoffkonstanten der Wärmeleitfähigkeit
A	Fläche
A	Jacobimatrix
a	Schallgeschwindigkeit
c_{b1}, c_{b2}, c_{v1}	Konstanten im Turbulenzmodell
c_{w1}, c_{w2}, c_{w3}	Konstanten im Turbulenzmodell
c_p, c_V	spezifische Wärmekapazität
D	Durchmesser
D	Einheitstensor
d	(Wand-) Abstand
E	Gesamtenergie
e	innere Energie
e	Einheitsvektor
f_v, f_{w1}	Wandfunktionen
F	Flußdichtevektor
F	Flußdichtetensor
g	Limitierungsfunktion
H	Gesamtenthalpie
h	Enthalpie
h	Plancksches Wirkungsquantum ($6,626 \cdot 10^{-34}$ Js)
k	turbulente kinetische Energie
k_v	Reaktionsrate der Vorwärtsreaktion
k_r	Reaktionsrate der Rückwärtsreaktion
k_B	Boltzmannkonstante ($1,381 \cdot 10^{-23}$ J/K)
L	charakteristische Länge, Limitierungsfunktion
l	Länge
l_r	Relaxationslänge
M	Molmasse, $M = N_A m$
m	Teilchenmasse
N	Teilchenzahldichte
N_A	Avogadrozahl ($6,022 \cdot 10^{23}$ 1/mol)
n	Normalenvektor, n = (n_x, n_y, n_z)
p	Druck

Q	Zustandssumme
\mathbf{Q}	Fluß
\dot{q}	Wärmestromdichte
R	Gaskonstante (8,31416 J/(mol K))
R	Radius
R_{ij}	Komponenten des Reynoldsschen Spannungstensors
\mathbf{R}	Vektor der Residuen
\mathbf{R}	Reynoldsscher Spannungstensor
r	Recovery-Faktor
S	Sutherlandkonstante
S_{ij}	Komponenten des Verzerrungstensors
\mathbf{S}	Verzerrungstensor
s	Entropie
T	Temperatur
\mathbf{T}	Schubspannungstensor
T_g	Grenztemperatur
t	Zeit
u, v, w	kartesische Geschwindigkeitskomponenten (auch u_k)
u^+	dimensionslose Geschwindigkeit
u_τ	Schubspannungsgeschwindigkeit
\mathbf{u}	Geschwindigkeitsvektor, $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$
V	Volumen
\mathbf{w}	Vektor der Erhaltungsgrößen
x_l	Laufänge
\mathbf{x}	Ortsvektor, $\mathbf{x} = (x, y, z)^T$
x, y, z	kartesische Koordinaten (auch x_k)
X, Y	Platzhalter für chemische Symbole (Edukte und Produkte)
y	Massenanteil
y^+	dimensionsloser Wandabstand
\mathbf{Z}	Strukturmatrix
z_{es}	Strukturmatrizelement

Griechische Symbole

α_k	Runge-Kutta Koeffizienten
γ	Isentropenexponent
Δ	Differenz
δ	Grenzschichtdicke
δ_{ij}	Komponenten des Einheitstensors
ζ	y/δ
η	$\ln \xi$
θ	charakteristische Temperatur
κ	Wärmeleitfähigkeit, von Karman Konstante

λ	Größe im Turbulenzmodell
μ	chemische Potential, dynamische Viskosität
ν	kinematische Viskosität
ν^*	modifizierte kinematische Viskosität
ξ	spezifische Stoffmenge, $\xi = \frac{y}{M}$
ρ	Dichte
σ	Symmetriefaktor, Konstante im Turbulenzmodell
τ	$\ln T$
τ_{ij}	Schub-, Normalspannung
τ_w	Wandschubspannung
ϕ	Winkel, Platzhalter für physikalische Größe
Ω	Berandung, $\Omega = \partial V$
ω	Relaxationsparameter, Wirbelstärke, $\omega = \nabla \times \mathbf{u}$

Indizes

0	Referenz-, Ruhegröße
$\frac{1}{2}$	Zwischenzustand
∞	Anströmgröße
+, −	aufgespaltene Größen nach Van Leer
anh	anharmonischer Vibrationsanteil
diss	dissipativer Anteil
dual	Wert des dualen Zeitschrittverfahrens
e	Größen am Grenzschichtrand
eff	Effektivwert
el	elektronischer Anteil
inner	innerer Anteil
(i)	i-te Iteration, i-ter Zustand
k	Kopplungsanteil
konv	konvektiver Anteil
rot	Rotationsanteil
Rand	Randwert
s	Stoßgrößen
t	turbulenter Wert
trans	Translationsanteil
vib	harmonischer Vibrationsanteil
max	Maximum
min	Minimum
w	Wandwert

Dimensionslose Kennzahlen

Da	Damköhlerzahl
Ma	Machzahl
Pr	Prandtlzahl
Pr_t	turbulente Prandtlzahl
Re	Reynoldszahl
Sc	Schmidtzahl

Abkürzungen

CALTEC	California Institute of Technology
CEVCATS-N	Cell Vertex Central Averaged Time Stepping - Nonequilibrium Verfahren zur Strömungssimulation auf strukturierten Netzen
DLR	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e. V.
HEG	Hochenthalpiekanal Göttingen
L1d	Lagrange 1-dimensional Verfahren zur 1-dimensionalen Simulation von Stoßrohrkanälen
NASA	National Aeronautics and Space Administration
TAU	Triangular Adaptive Upwind Verfahren zur Strömungssimulation auf hybriden Netzen

Notation

Variablen werden mit kursiven Buchstaben bezeichnet (u, ρ, H), Vektoren werden in Fettschrift (\mathbf{u}, \mathbf{F}) und Tensoren zweiter Stufe und Matrizen in fetter serifenloser Schrift (\mathbf{F}, \mathbf{Z}) gesetzt. Konstanten und Operatoren ($h, N_A, \sin()$) werden in aufrechter Schrift gesetzt. Für Vektorprodukte gilt die folgende Notation in Vektor- bzw. Komponentenschreibweise:

$c = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$	$c = \sum_k a_k b_k$	Skalarprodukt
$\mathbf{M} = \mathbf{a}\mathbf{b}$	$M_{ij} = a_i b_j$	dyadisches Produkt

Es ist nicht gänzlich gelungen Doppelbezeichnungen zu vermeiden. Die jeweilige Bedeutung sollte sich dem Leser jedoch aus dem Kontext erschließen. Bezeichnungen von Hilfsvariable bzw. -funktionen sind hier nicht aufgeführt, die Definition erfolgt an entsprechender Stelle im Text.

1 Einleitung

Bei der Entwicklung schnell fliegender Körper sogenannter Hyperschallflugkörper wie Raketen oder Raumfahrzeuge, die in die Atmosphäre eines Planeten eintreten, spielen neben strömungsmechanischen auch thermodynamische Aspekte eine entscheidende Rolle. Gleiches gilt auch für Hyperschall-Triebwerke sogenannte Scramjet Triebwerke, an deren Entwicklung in den letzten Jahren verstärkt gearbeitet wird. Charakteristisch für diese hochenthalpen Stömungen ist das Auftreten chemischer Reaktionen. In der Literatur werden sie auch als reagierende Hyperschallströmungen bezeichnet. Dabei ist nicht allein die hohe Machzahl sondern vielmehr die hohe Relativgeschwindigkeit zwischen Flugkörper und Gas von Bedeutung. Das Aufstauen des Fluides hoher kinetischer Energie vor einem Körper führt dabei zu einem Anstieg der inneren Energie. Überschreitet diese eine charakteristische Aktivierungsenergie, werden thermische und chemische Zustandsänderungen in Gang gesetzt. Zunächst werden energetisch höhere Zustände der Moleküle wie Rotations-, Vibrations- und elektronische Freiheitsgrade angeregt, bevor das Gas bei höheren Temperaturen dissoziiert und ionisiert. Neben Flugexperimenten und numerischen Simulationen spielen Windkanalexperimente bei der Untersuchung von Hochenthalpieströmungen eine wichtige Rolle. Eine Anlage zur Erzeugung solcher Strömungen ist der Hochenthalpiekanal Göttingen.

1.1 Hochenthalpiekanal Göttingen

Der Hochenthalpiekanal Göttingen HEG [20] wird vom Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt e. V. in Göttingen zur Untersuchung von Hochenthalpieströmungen betrieben. Bei der Anlage handelt es sich um ein flugkolbengetriebenes Stoßwellenrohr, wie es von Stalker [49] zur Untersuchung

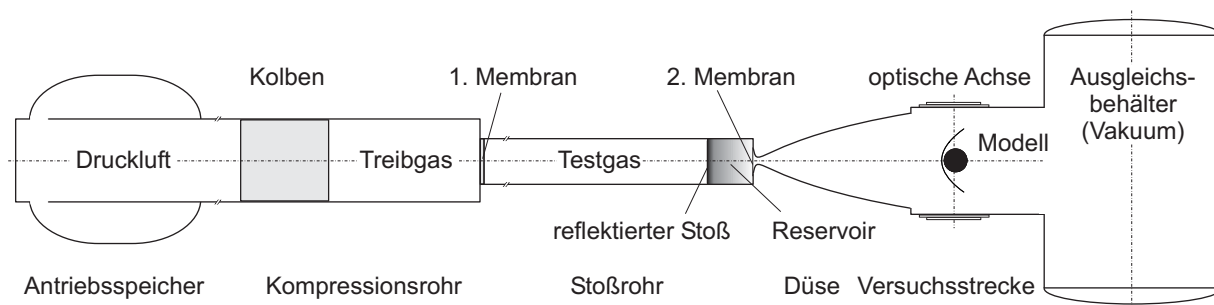


Abbildung 1.1: Prinzipskizze des Göttinger Hochenthalpiekanals.

Tabelle 1.1: Reservoir- und Anströmbedingung für HEG Versuchsbedingung I.

h_0 [MJ/kg]	T_0 [K]	p_0 [MPa]	u_∞	T_∞ [K]	ρ_∞ [kg/m ³]	p_∞ [Pa]	Ma_∞
22	9100	35	5900	1140	0,0017	660	8,2

strömungsmechanischer Vorgänge im Hyperschall vorgeschlagen wurde. Einen umfangreichen Überblick über die Theorie und die Anwendung verschiedener Stoßrohrtypen gibt Oertel [35]. Abbildung 1.1 zeigt eine Prinzipskizze des HEG. Ein druckluftgetriebener Kolben verdichtet im 33 m langen Kompressionsrohr das Treibgas, ein Helium-Argon Gemisch, quasi-adiabat. Für die untersuchte Versuchsbedingung I bringt das Treibgas bei einem Druck von 50 MPa eine 8 mm starke Edstahlscheibe am Ende des Kompressionsrohres zum Bersten. Die entstehende Stoßwelle läuft in das 17 m lange, mit dem Testgas gefüllte Stoßrohr. Durch Reflexion am Rohrende wird das Gas auf den sogenannten Reservoirzustand von 35 MPa bei über 9000 K komprimiert. Dabei platzt eine zweite, 75 μ m dicke Mylarmembran, die das Testgas im Stoßrohr vom Vakuum in der Düse und der sich anschließenden Versuchsstrecke und dem Ausgleichsbehälter trennt. Nach Platzen der zweiten Membran expandiert das Gas aus dem Reservoir durch die 3,75 m lange konische Lavalldüse. Die Düse mit einem Halböffnungswinkel von 6,5° misst im engsten Querschnitt 22 mm im Durchmesser. Das Flächenverhältnis beträgt 1600. Die sich anschließende Versuchsstrecke hat einen Durchmesser von 1,2 m. Am Düsenaustritt erreicht die Strömung eine Geschwindigkeiten von ca. 6 km/s bei einer Machzahl von 8. Die Kernströmung hat einen Durchmesser von 0,4 m. Die Versuchszeit im HEG beträgt einige Millisekunden. Tabelle 1.1 enthält neben den Reservoir- auch die Anströmgrößen für Versuchsbedingung I. Um das Modell in der Versuchsstrecke vor Beschädigung durch Splitter der ersten Membran zu schützen, ist vor dem engsten Düsenquerschnitt ein sogenannter Partikelstopper montiert, der das direkte Eintreten von Partikeln in die Düse verhindert. Neben der genannten Bedingung I stehen im HEG weitere Versuchsbedingungen zur Verfügung, die

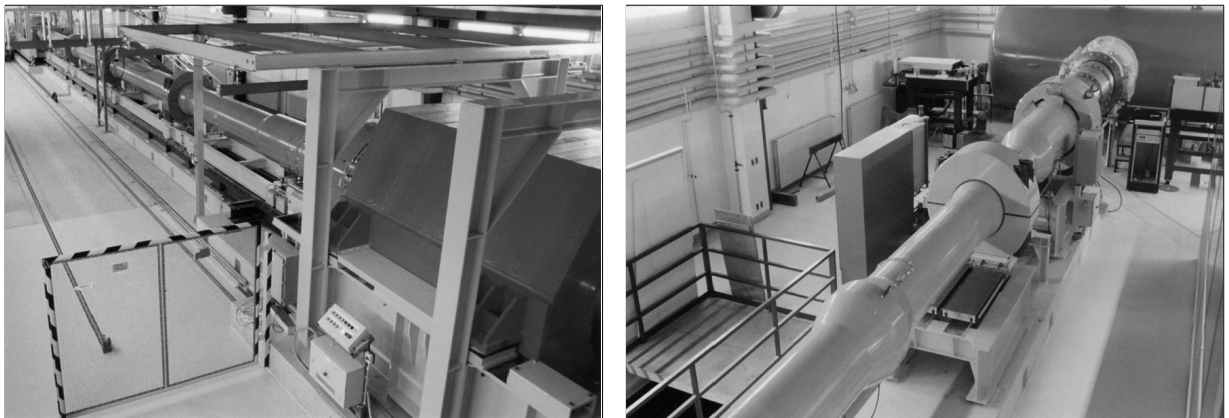


Abbildung 1.2: Fotografische Abbildung des Göttinger Hochenthalpiekanals. Links sind Kompressionsrohr und Antriebsspeicher, rechts Stoßrohr mit Düse, Versuchsstrecke und Vakuumtank zu sehen.

sich durch Variation der Fülldrücke der Rohre, der Kolbenmasse sowie der Düsengeometrie einstellen lassen. Abbildung 1.2 zeigt zwei Fotos des Hochentalpiekanals. Auf der linken Seite sind das Kompressionsrohr und der Druckluftspeicher, rechts das Stoßrohr mit sich anschließender Düse, Versuchsstrecke und Vakuumtank abgebildet.

Die zu untersuchenden Modelle in der Versuchsstrecke des HEG können sowohl mit Thermoelementen zur Bestimmung der Wärmeübergänge als auch mit piezoresistiven Drucksensoren zur Messung der Oberflächendrücke bestückt werden. Fenster in der Versuchsstrecke erlauben die Verwendung verschiedener optischer Meßtechniken wie Schlieren- oder Schattenaufnahmen [41], holographische Interferometrie [32] und Verfahren, die auf der Emission elektromagnetischer Strahlung angeregter Moleküle oder Atome basieren. Mit Hilfe einer 3-Komponenten Waage können die während des Versuchs auf das Modell einwirkenden, aerodynamischen Kräfte gemessen werden.

1.2 Strömung im Stoßwellenrohr

Anhand eines Weg-Zeit Diagramms zeigt Abbildung 1.3 den Ablauf eines Versuchs im HEG. Der Kolben wird im Kompressionsrohr beschleunigt und verdichtet dabei das Treibgas, was zu einer Verzögerung des Kolbens führt. Nach dem Bersten der Membran läuft eine Stoßwelle gefolgt von der Kontaktfläche zwischen Treib- und Testgas in das Stoßrohr. Im Kompressionsrohr breiten sich Expansionswellen aus, die an der Stirnfläche des Kolbens reflektiert werden und dann ebenfalls in das Stoßrohr laufen. Nach Reflexion der Stoßwelle an der Endwand baut sich die Düsenströmung auf. Idealerweise bringt die reflektierte Stoßwelle die Trennfläche zwischen Treib- und Testgas zum Stillstand. Durch die

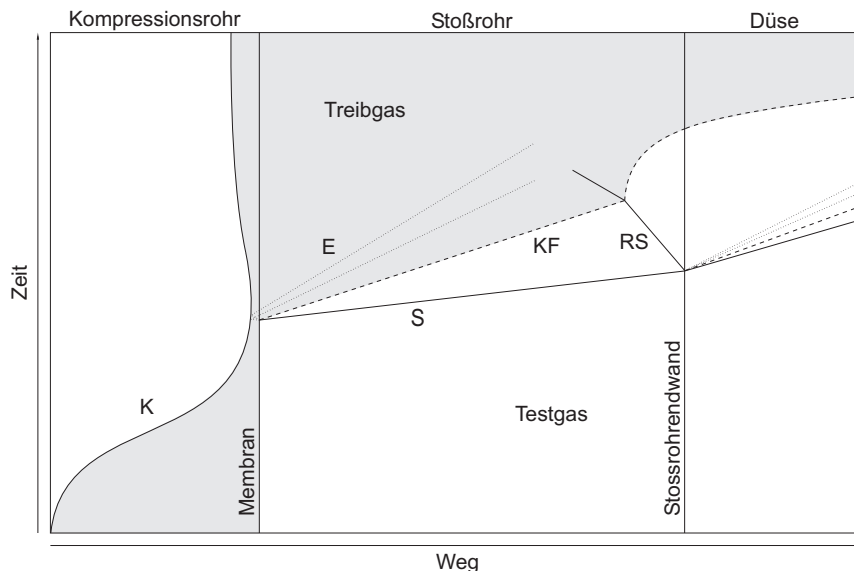


Abbildung 1.3: Weg-Zeit Diagramm eines kolbengetriebenen Stoßwellenrohres. Kolbentrajektorie (K), Stoßwelle (S), reflektierte Stoßwelle (RS), Kontaktfläche (KF) und Expansionswellen (E).

Expansion des Reservoirgases in der Düse wird die Kontaktfläche wieder beschleunigt und tritt schließlich in die Düse ein. Die Versuchszeit endet mit dem Eintreffen der Kontaktfläche zwischen Treib- und Testgas oder der von der Stirnfläche des Kolbens reflektierten Expansionswellen.

Diese ideale Betrachtungsweise vernachlässigt jedoch einige physikalische Effekte, die in der Realität einen gravierenden Einfluß auf die Strömung im Stoßrohr und in der Versuchsstrecke haben können. So wird zum Beispiel von einem instantanen, vollständigen Öffnen der Membran ausgegangen. Bei den meist in Stoßrohren verwendeten Membranen handelt es sich um einige Millimeter starke Metallscheiben, sogenannte Berstscheiben. In der Regel verfügen diese über eine Sollbruchstelle, um ein bestimmtes Öffnungsverhalten zu erreichen und unnötige Splitterbildung zu vermeiden. Unter einer bestimmten Druckbelastung beginnen diese Scheiben vom Mittelpunkt aus entlang der Sollbruchstelle zu reißen. Die Dauer des Öffnungsvorgangs liegt im Bereich eines Bruchteils einer Sekunde. Petrie-Repar [36] hat den Einfluß des Öffnungsvorgangs auf die Stömung im Stoßrohr numerisch untersucht. Durch das allmähliche Öffnen bildet sich ein Treibgasstrahl, der in der Rohrmitte in das Testgas schießt und eine kugelförmige Stoßwelle induziert. Petrie-Repar beobachtet durch dieses Verhalten einen Einfluß auf die Ausbreitungsgeschwindigkeit der primären Stoßwelle. Die Stoßgeschwindigkeit übersteigt die Geschwindigkeit, die durch die 1-dimensionale Theorie vorausgesagt wird. Als Erklärung werden temporär im Strömungsfeld auftretende Schrägstoßwellen angegeben, die durch Reflexion der kugelförmigen Welle an den Stoßrohrwänden entstehen und die die Entropie des Gases erhöhen. Außerdem kommt es durch diesen Vorgang zu einer Durchmischung von Treib- und Testgas. Die Form der Kontaktfläche ist dabei abhängig vom Druckverhältnis und somit Expansionsverhalten des Treibgases. Bei sehr starker Expansion erreicht das Treibgas sehr schnell die Stoßrohrwand und schnürt einen Teil des Testgases ab. Dieses sich langsam stromab ausbreitende schwerere Testgas wirkt auf das nachströmende Treibgas wie ein Hindernis. Desweiteren werden in der idealen Betrachtung der Stoßrohrströmung die viskosen Eigenschaften der Gase vernachlässigt. Die innere Reibung führt dazu, daß sich hinter der primären Stoßwelle eine Grenzschicht entlang der Stoßrohrwand ausbildet. Die sich entwickelnde Grenzschicht induziert Quergeschwindigkeiten, die laut Mirels [33] mit den

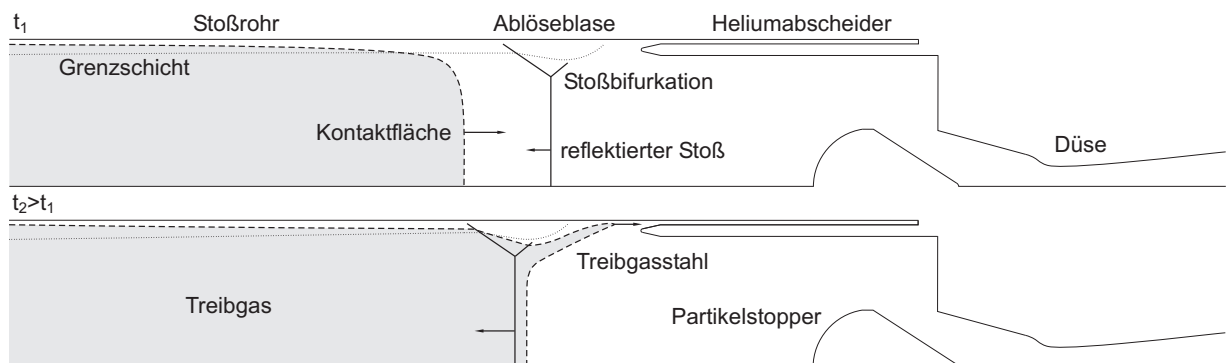


Abbildung 1.4: Schematische Darstellung des Prozesses der Treibgaskontamination im HEG.

einhergehenden schwachen Druckwellen zu einer Verminderung der Geschwindigkeit der primären Stoßwelle führen.

Nach der Reflexion der primären Stoßwelle an der Endwand des Rohres läuft diese wieder stromauf. Der Druckanstieg über diese reflektierte Welle kann zu einem Ablösen der Wandgrenzschicht führen. Da das Gas im Stoßrohr hinter der primären Stoßwelle mit Überschallgeschwindigkeit strömt, bildet sich vor der Ablöseblase ein schräger Verdichtungsstoß aus. Die Interaktion dieses Schrägstoßes mit dem reflektierten senkrechten Stoß führt zur Bildung eines Gabelstoßes. Dieser Prozess wird auch als Stoßbifurkation bezeichnet. Stromab der beiden schrägen Stöße ist die Geschwindigkeit höher als hinter dem senkrechten Stoß. Ausgehend vom Tripelpunkt der Wechselwirkung bildet sich eine Scherschicht aus. Die unterschiedlichen Strömungsgeschwindigkeiten stromab des Gabelstoßes führen dazu, daß Grenzschichtgas in einem Strahl entlang der Wand das Stoßbrohrende erreicht.

Mark [30] hat aufgrund experimenteller Untersuchungen erstmals eine Theorie zur Stoßbifurkation entwickelt und die Freistrahlbildung beschrieben. Basierend auf dieser Arbeit berichten Davies und Wilson [8] über ein vorzeitiges Testzeitende in Stoßwellenrohren mit niedrigen Enthalpien aufgrund der Wechselwirkung der reflektierten Stoßwelle mit der Treibgaskontaktfläche. Stalker und Crane [49] erweiterten diese Theorie auf Hochenthalpiestoßrohre. Dabei erreicht, nachdem die reflektierte Stoßwelle auf die Kontaktfläche trifft, Treibgas auf dieselbe Weise das Stoßbrohrende. Strömt das so verunreinigte Reservoirgas durch die Düse steigt aufgrund des höheren Isentropenexponenten die Machzahl am Düsenaustritt. Abbildung 1.4 zeigt schematisch den Prozess der Stoßbifurkation mit anschließender Treibgasstrahlbildung.

Numerische Untersuchungen zur Stoßbifurkation und deren Einfluß auf den Reservoirzustand wurden von Weber et al. [57] durchgeführt. Die Kontaktfläche wurde dabei nicht berücksichtigt.

Die Strömung im lichtbogenbeheizten Stoßrohr des NASA Ames Forschungszentrums wurde von Wilson et al. [60] numerisch simuliert. Darin strömt vor der eigentlichen Treibgasankunft kaltes Testgas über die Schrägstoße in den Reservoirbereich.

Goozée et al. [15] beobachten bei der Simulation eines Stoßrohres der Universität Queensland bei niedrigen Enthalpien ein Unterdrücken der Treibgasstrahlbildung durch Wirbel, die im Testgas durch Interaktion mit dem Gabelstoßsystem entstehen. Allerdings transportieren die bei der Wechselwirkung des reflektierten Stoßes mit der Kontaktfläche entstandenen Wirbel Treibgas in Richtung der Endwand.

Chue und Eitelberg [7] haben das Strömungsfeld im Stoßrohr des HEG numerisch untersucht. Die Ergebnisse der Idealgasberechnungen bestätigen die vorzeitige Treibgasankunft. Außerdem wird ein im Vergleich zur 1-dimesionalen Theorie geringerer Reservoirdruck beobachtet, der mit dem Aufstauen des Fluides in der Ablöseblase und einer dadurch geringeren Kompression erklärt wird.

Zur Unterdrückung der vorzeitigen Treibgasankunft wird von Dumitrescu [10] eine Vorrichtung zum Absaugen des Treibgasstrahls vorgeschlagen. Experimentelle und numerische Tests von Chue und Dumitrescu [6] für hohe und niedrige Enthalpien und verschiedene Größen des Absaugschlitzes zeigen zwar einen glatteren Verlauf der Temperatur für niedrige Enthalpie, bei der hauptsächlich kaltes Testgas aus der Grenzschicht die Endwand

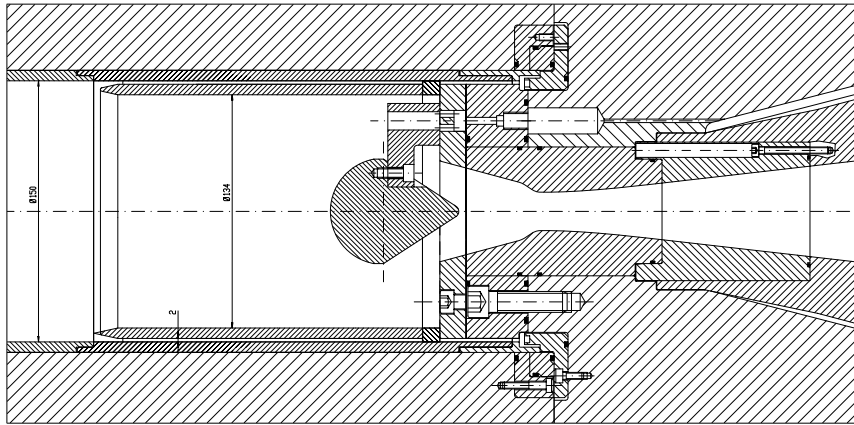


Abbildung 1.5: Detailansicht des Stoßrohrendes im HEG mit Partikelstopper, Heliumabscheider und Düsenhals.

erreicht, die Wirksamkeit bei hoher Enthalpie mit Treibgasstrahlbildung konnte jedoch nicht gezeigt werden.

Sudani und Hornung [51] haben eine ähnliche Konfiguration im Hochgeschwindigkeitsstoßrohrkanal T5 des CALTEC getestet, deren Wirksamkeit ebenfalls nicht gezeigt werden konnte. Der Grad der Treibgaskontamination wurde mittels eines Detektors gemessen, dessen Funktionsweise auf dem Blockieren einer Kanalströmung bei steigender Anströmmachzahl basiert.

Sudani et al. [53] haben die Vorrichtung dahingehend modifiziert, daß nicht mehr am Ende des Stoßrohres sondern stromauf abgesaugt wird. Die Vorrichtung, die aus einem zweiten Rohr besteht, das mit der Stoßrohrendwand einen ringförmigen Spalt bildet, soll den Treibgasstrahl am Ort seines Entstehens absaugen.

Aufgrund der Wirksamkeit dieses Verfahrens im T5 wurde eine leicht veränderte Version dieser Anordnung von Hannemann et al. [21] im HEG für die in Tabelle 1.1 angegebene Versuchsbedingung getestet. Da im HEG ein zusätzliches Volumen fehlt, steht anders als im T5 lediglich der Spalt zwischen beiden Rohren zur Aufnahme des Treibgases zur Verfügung. Abbildung 1.5 zeigt das Stoßrohrende im HEG mit Düseneinlauf, Partikelstopper und Heliumabscheider.

Die Abbildungen 1.6 und 1.7 zeigen den zeitlichen Verlauf des statischen und des Pitotdrucks in der Versuchsstrecke des HEG für die Versuche 513 und 514. Da der Verlauf beider Drücke durch den Reservoirzustand bestimmt wird, ist zusätzlich der Reservoirdruck dargestellt. Eine Verschiebung um 0,7 ms berücksichtigt die räumliche Distanz zwischen den Sensoren im Reservoir und denen in der Versuchsstrecke. Zum Meßverfahren der Drücke, insbesondere des statischen Drucks in Hyperschallströmungen wird auf die Arbeit von Martinez Schramm [31] verwiesen. Statischer Druck und Pitotdruck folgen dem Verlauf des Reservoirdrucks bis für Versuch 513 ein Abfall des statischen Drucks bei 2,0 ms beobachtet wird. Die Änderung des Gaszustandes im Reservoir durch Kontamination mit dem leichteren Treibgas Helium, führt zu einem anderen Expansionsverhalten des Gases beim Durchströmen der Düse; die Machzahl der Strömung steigt. Da der statische Druck im Gegensatz zum Staudruck sensitiv auf die Änderung der Anströmung reagiert, gilt sein

Abfallen als Indiz für eine Verunreinigung der Strömung mit Treibgas.

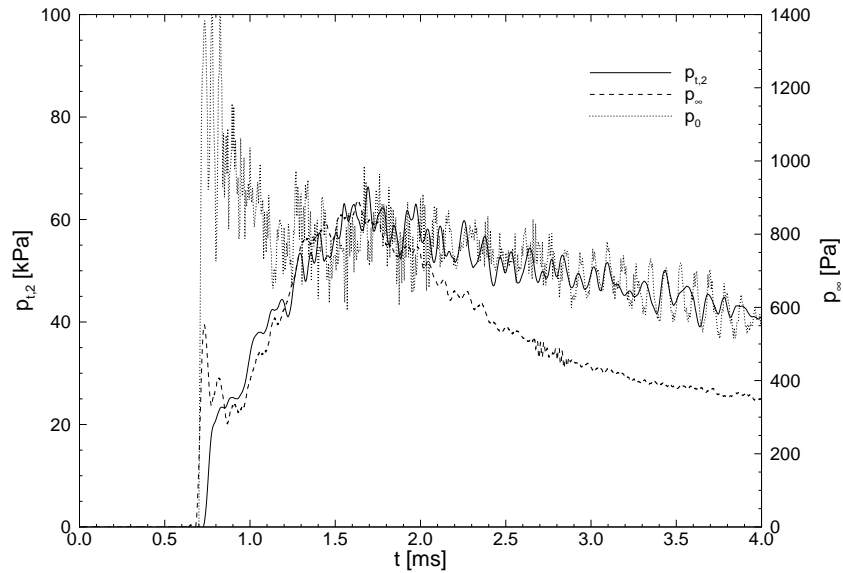


Abbildung 1.6: Gemessene Druckverläufe im HEG ohne Heliumabscheider. Dargestellt ist die zeitliche Entwicklung von Reservoirdruck (ohne Skala), statischem Druck und Staudruck für Versuch 513 .

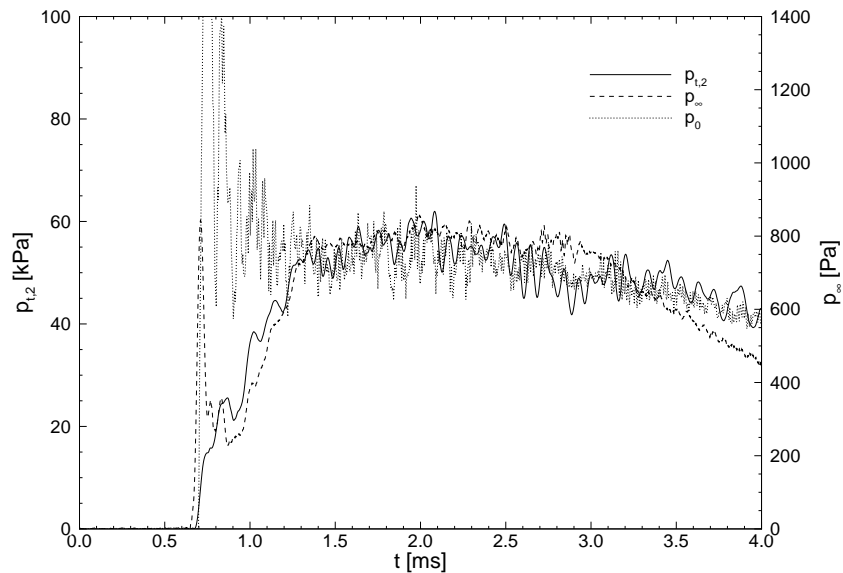


Abbildung 1.7: Gemessene Druckverläufe im HEG mit Heliumabscheider. Dargestellt ist die zeitliche Entwicklung von Reservoirdruck (ohne Skala), statischem Druck und Staudruck für Versuch 514.

Im Gegensatz zu Abbildung 1.6 zeigt 1.7 die Druckverläufe für dieselbe HEG Bedingung bei Verwendung des Heliumabscheiders. Der Abfall des statischen Drucks beginnt deutlich später bei 3,0 ms, was eine Verlängerung der nutzbaren Testzeit im HEG bedeutet.

Messungen von Sudani et al. [52] im HEG mit dem von ihm entwickelten Treibgasdetektor bestätigen die Verzögerung der Treibgaskontamination und die Verlängerung der Meßzeit bei Verwendung des Heliumabscheiders.

1.3 Zielsetzung

Ziel der Arbeit ist die numerische Simulation der Stoßrohrströmung im Hochenthalpiekanal Göttingen unter besonderer Berücksichtigung der Treibgaskontamination. Für die Simulation steht mit dem TAU Code ein unstrukturiertes Verfahren zur Verfügung. Um Stoßwellen und Kontaktunstetigkeiten mit hoher Auflösung instationär verfolgen zu können, soll die indikatorbasierte lokale Netzverfeinerung des Verfahrens verwendet werden. Da das Testgas im HEG starken Zustandsänderungen unterliegt, kann es nicht mehr als ideal betrachtet werden. Somit ist zunächst eine Modellierung für chemisch reagierende Gase zu implementieren und zu validieren. Zusätzlich ist das Verfahren hinsichtlich der Fähigkeit der Simulation von bewegten Kontaktunstetigkeiten zwischen verschiedenen Gasen zu untersuchen. Da die Simulation der gesamten Anlage mit den zur Verfügung stehenden Ressourcen zur Zeit nicht möglich ist, muß eine spezielle Randbedingung formuliert werden, die es ermöglicht, das instationäre Grenzschichtwachstum hinter einer laufenden Stoßwelle, sowie das Einströmen des Treibgases zu beschreiben.

2 Physikalische Modellierung

Wie bereits in der Einleitung beschrieben, führt das Ansteigen der inneren Energie eines Gases im allgemeinen nicht zu einer im gleichen Maße steigenden Temperatur. Der Zustand des Gases kann also nicht mehr als ideal betrachtet werden. Mit steigender Energie werden innere Freiheitsgrade der Teilchen wie Molekülschwingungen oder energetisch höhere Elektronenzustände angeregt. Wird die Dissoziations- bzw. Ionisationsenergie erreicht, ändert sich zudem die chemische Zusammensetzung des Gases. Abhängig von der Geschwindigkeit, mit der die thermischen und chemischen Zustandsänderungen ablaufen, werden drei Arten von Strömungen unterschieden. Dabei wird eine charakteristische Länge L des Strömungsfeldes in Bezug zur Relaxationslänge l_r gesetzt. Die Relaxationslänge ergibt sich dabei aus der Reaktionsrate und der lokalen Strömungsgeschwindigkeit. Der dimensionslose Quotient aus der charakteristischen Länge und der Relaxationslänge wird als Damköhlerzahl Da bezeichnet.

$$Da = \frac{L}{l_r} \quad (2.1)$$

Ist die Relaxationslänge sehr viel größer als die charakteristische Länge, die Damköhlerzahl also sehr viel kleiner als 1, spricht man von eingefrorener Strömung, Zustandsänderungen spielen im betrachteten Strömungsgebiet nur eine untergeordnete Rolle. Liegt die charakteristische Länge in der Größenordnung der Relaxationslänge spricht man von Nichtgleichgewichtsströmung, d. h. die thermische und chemische Zusammensetzung des Gases ändert sich im betrachteten Strömungsfeld fortwährend. Im Grenzfall großer Damköhlerzahlen laufen die Reaktionen sehr viel schneller als die strömungsmechanischen Vorgänge ab. Das Fluid kann als lokal im Gleichgewicht befindlich betrachtet werden. Im allgemeinen sind die Reaktionsgeschwindigkeiten der einzelnen thermischen Zustandsänderungen und chemische Reaktionen verschieden, so daß sich für jede Zustandsänderung und jede Reaktion eine eigene Relaxationslänge und somit eine eigene Damköhlerzahl ergibt.

Bei den in der vorliegenden Arbeit untersuchten hochenthalpen Stoßrohrströmungen spielt die Änderung der thermischen und chemischen Zusammensetzung des Fluides eine nicht zu vernachlässigende Rolle. Sich schnell ausbreitende starke Stoßwellen bewirken in sehr kurzer Zeit erhebliche Änderungen des Gaszustandes. Da aber die numerische Simulation von Nichtgleichgewichtsströmungen, hier zudem in Verbindung mit instationären Vorgängen, sehr zeitaufwendig ist, wird nur der Grenzfall des thermochemischen Gleichgewichtszustandes betrachtet. Zudem erfolgt auf mikroskopischer Ebene die Einstellung des Gleichgewichtszustandes durch intermolekulare Stöße. Mit steigender Dichte hinter einer Stoßwelle erhöht sich auch die Anzahl dieser intermolekularen Stöße, so daß das Fluid relativ schnell in den Gleichgewichtszustand relaxieren kann.

In diesem Kapitel wird das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Verfahren zur Berechnung von Gleichgewichtszuständen reagierender Gasgemische beschrieben.

2.1 Gleichgewichtszustand reagierender Gasgemische

2.1.1 Struktur und Gleichgewichtsbedingung

Im folgenden wird ein aus S Spezies bestehendes Gemisch schwach wechselwirkender Partikel betrachtet. Unter der Voraussetzung der schwachen Wechselwirkung kann jede Spezies als thermisch ideales Gas behandelt werden. Das Vorgehen zur Berechnung des Gleichgewichtszustandes folgt im Wesentlichen der Formulierung von Liu und Vinokur [27], während der Berechnung der Zustandsgrößen der Spezies die Arbeiten von Esser [13] und Bottin [3] zugrunde liegen.

Der Gleichgewichtszustand eines beliebigen Gasgemisches ist durch zwei Zustandsgrößen eindeutig bestimmt. Formal werden die S Spezies aus den E Elementen gemäß der chemischen Reaktionen

$$Y_s \rightleftharpoons \sum_e z_{es} X_e \quad s = 1, \dots, S \quad e = 1, \dots, E \quad (2.2)$$

gebildet, wobei Y_s und X_e die Reaktionsprodukte bzw. -edukte bezeichnen. z_{es} sind die Komponenten der Strukturmatrix \mathbf{Z} des Gemisches. Sie beschreibt die Abhängigkeiten der einzelnen Reaktionspartner voneinander. Ihre Komponenten sind die stoichiometrischen Koeffizienten für jede Reaktion bezogen auf die gewählten Basiselemente. Im allgemeinen bilden die atomaren Spezies eine elementare Basis. Wird Ionisation betrachtet empfiehlt es sich das Elektron ebenfalls als elementare Komponente zu betrachten. Moleküle und Ionen lassen sich dann als Linearkombination der Elemente beschreiben. Ebensogut ist jede andere linear unabhängige Kombination von Teilchen als Basis möglich. Betrachtet man ein 5-Spezies Luftgemisch bestehend aus N_2 , N , O_2 , O und NO ergibt sich folgende Strukturmatrix \mathbf{Z} zur Basis N und O

$$\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 2 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad . \quad (2.3)$$

Im Gleichgewichtszustand sind die Raten der Hin- und Rückreaktion gleich, d. h. die Zusammensetzung des Gemisches ist konstant. Außerdem ist der Gleichgewichtszustand eines Systems durch das Maximum der Entropie bestimmt. Schreibt man die Entropie s als Funktion der inneren Energie e , der Gesamtdichte ρ sowie sämtlicher spezifischer Stoffmengen ξ_s ergibt sich deren Änderung als

$$ds = \frac{1}{T} de - \frac{p}{T\rho^2} d\rho + \frac{1}{T} \sum_s \mu_s d\xi_s \quad . \quad (2.4)$$

Die spezifische Stoffmenge ξ_s einer Spezies ist definiert durch ihren Massenanteil am Gemisch y_s dividiert durch ihre Molmasse M_s

$$\xi_s = \frac{y_s}{M_s} = \frac{\rho_s}{\rho M_s} \quad . \quad (2.5)$$

μ_s bezeichnet das chemische Potential, welches sich als Differenz aus Enthalpie h_s und der gebundener Energie Ts_s ergibt

$$\mu_s = h_s - Ts_s \quad . \quad (2.6)$$

Enthält das System nur eine einzige Komponente, ist das chemische Potential mit der Gibbssenthalpie identisch. Bei konstanter Energie und Dichte ergibt sich

$$ds = \frac{1}{T} \sum_s \mu_s d\xi_s \quad (2.7)$$

und mit der Gleichgewichtsbedingung $ds = 0$

$$\sum_s \mu_s d\xi_s = 0 \quad . \quad (2.8)$$

Gleichung (2.8) beschreibt den irreversiblen Anteil der Entropie aufgrund der Änderung der chemischen Zusammensetzung des Gemisches.

Die vollständige Beschreibung des Systems erfordert die Berechnung der S unbekannten spezifischen Stoffmengen ξ_s bei gegebener Dichte und Energie. E Gleichungen ergeben sich aus der Tatsache, daß unter Ausschluß nuklearer Reaktionen in chemischen Reaktionen die Anzahl der einzelnen Elemente konstant bleibt. Die Gleichungen (2.9) werden daher auch als Elementerhaltungsgleichungen bezeichnet.

$$\sum_s z_{es} \xi_s = \bar{\xi}_e = \text{const} \quad e = 1, \dots, E \quad (2.9)$$

Die Anzahl der einzelnen Elemente $\bar{\xi}_e$ muß für jedes Gemisch vorgegeben werden. Sie beschreiben die Zusammensetzung auf Basis der elementaren Komponenten. Für das hier betrachtete Luftgemisch wird eine Zusammensetzung von Stickstoff zu Sauerstoff mit einem Massenverhältniss von 0,76 zu 0,24 angenommen. Die Zusammensetzung des Gemisches aus den einzelnen Spezies s kann nicht unabhängig voneinander variieren. Sie gehorcht den Elementerhaltungsgleichungen (2.9). Zerlegt man diese und Gleichung (2.8) in seine E elementaren und $N = S - E$ nichtelementaren Komponenten ergibt sich

$$\xi_e + \sum_n z_{en} \xi_n = \bar{\xi}_e \quad (2.10)$$

bzw.

$$\sum_e \mu_e d\xi_e + \sum_n \mu_n d\xi_n = 0 \quad . \quad (2.11)$$

In differentieller Form lautet Gleichung (2.10)

$$d\xi_e + \sum_n z_{en} d\xi_n = 0 \quad (2.12)$$

Substitution von $d\xi_e$ in Gleichung (2.11) ergibt nach Umformung

$$\sum_n \left(\mu_n - \sum_e z_{ne} \mu_e \right) d\xi_n = 0 \quad . \quad (2.13)$$

Aufgrund der so erreichten Unabhängigkeit der ξ_n ergibt sich für jede der N nichtelementaren Spezies eine Gleichung der Form

$$\mu_n = \sum_e z_{ne} \mu_e \quad n = 1, \dots, N \quad . \quad (2.14)$$

Die Gleichungen (2.14) werden auch als Massenwirkungsgesetze bezeichnet. Sie besagen, daß im chemischen Gleichgewicht das chemische Potential der Edukte gleich dem der Produkte ist. Als allgemeines Gleichgewichtsprinzip kann äquivalent zum Entropiemaximum ein Verschwinden der chemischen Potentialdifferenz formuliert werden. Die Gleichgewichtsbedingungen minimaler Gibbsenthalpie oder Helmholtzenergie sind Spezialfälle für Systeme mit konstanten Zustandsgrößen Temperatur und Druck bzw. Temperatur und Dichte.

2.1.2 Numerische Berechnung der Zusammensetzung

Die Elementerhaltungsgleichungen (2.9) ergeben zusammen mit den Massenwirkungsgesetzen (2.14) ein Gleichungssystem zur Bestimmung der S spezifischen Stoffmengen ξ_s . Spaltet man die Entropie in einen temperatur- und einen druckabhängigen Anteil

$$s_s = s_s^0(T) - R \ln p_s \quad , \quad (2.15)$$

mit dem Partialdruck der Spezies s

$$p_s = RT \rho \xi_s \quad , \quad (2.16)$$

läßt sich das chemische Potential (2.6) schreiben als

$$\mu_s = \mu_s^0 + R T \ln (R T \rho \xi_s) \quad (2.17)$$

mit der nur von der Temperatur abhängigen Größe

$$\mu_s^0(T) = h_s - T s_s^0 \quad . \quad (2.18)$$

Da $\mu_s = \mu_s(T, \rho, \xi_s)$ eine Funktion der Dichte, Temperatur und der entsprechenden Stoffmenge ist, ist das obige Gleichungssystem nur vollständig, wenn ρ und T bekannt sind. Für den hier diskutierten Fall vorgegebener Energie und Dichte ist die Temperatur eine weitere Unbekannte, zu deren Lösung eine zusätzliche Gleichung in Form der inneren Energie e des Gasgemisches benötigt wird. Das vollständige Gleichungssystem lautet somit

$$\sum_s z_{es} \xi_s = \bar{\xi}_e \quad (2.19)$$

$$\sum_e z_{se} \mu_e = h_s - T s_s^0 + R T \ln (R T \rho \xi_s) \quad (2.20)$$

$$e = \sum_s \xi_s e_s \quad . \quad (2.21)$$

Dabei handelt es sich um ein nichtlineares Gleichungssystem für ξ_s und T , für das keine allgemeine Lösung angegeben werden kann. Zur Lösung wird deshalb ein numerisches Verfahren verwendet. Dabei ist zu beachten, daß die Lösungen ξ_s definitionsgemäß keine negativen Werte annehmen können. Außerdem können sie einen Maximalwert $\xi_{s,\max}$, der sich aus der Struktur des Gemisches und der elementaren Zusammensetzung ergibt, nicht überschreiten

$$\xi_s \in [0, \xi_{s,\max}] \quad . \quad (2.22)$$

Numerisch kann die untere Grenze des Lösungsbereichs zu Problemen führen. Da einige Massenanteile sehr kleine Werte annehmen können, z. B. Stickstoffmonoxid NO bei Raumtemperatur, werden, um den Anforderungen an die Genauigkeit gerecht zu werden, die Logarithmen der spezifischen Stoffmengen $\eta_s = \ln \xi_s$ als neue Variablen eingeführt. Führt man analog dazu auch den Logarithmus der Temperatur $\tau = \ln T$ als neue Variable ein, lauten die Gleichungen (2.19), (2.20) und (2.21)

$$\sum_s z_{es} e^{\eta_s} = \bar{\xi}_e \quad (2.23)$$

$$\sum_e z_{es} \frac{\mu_e}{R e^\tau} = \frac{h_s}{R T} - \frac{s_s^0}{R} + \ln R + \ln \rho + \tau + \eta_s \quad (2.24)$$

$$e = \sum_s e^{\eta_s} e_s \quad . \quad (2.25)$$

Das obige Gleichungssystem wird mit Hilfe eines Newtonverfahrens gelöst. Dabei werden die Gleichungen zunächst in der Umgebung einer bekannten Näherungslösung $\eta_s^{(0)}$ und $\tau^{(0)}$ linearisiert. Die Lösung des linearisierten Gleichungssystems $\Delta\eta_s$ bzw. $\Delta\tau$ führt dann nach $(n+1)$ Schritten zu einer verbesserten Näherungslösung

$$\eta_s^{(n+1)} = \eta_s^{(n)} + \Delta\eta_s \quad \text{bzw.} \quad \tau^{(n+1)} = \tau^{(n)} + \Delta\tau \quad . \quad (2.26)$$

Eine Entwicklung der Gleichungen (2.23), (2.24) und (2.25) um η_s und τ führt unter Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung auf das linearisierte Gleichungssystem

$$\sum_s z_{es} \xi_s^{(n)} \Delta\eta_s = \bar{\xi}_e - \sum_s z_{es} \xi_s^{(n)} \quad (2.27)$$

$$\Delta\eta_s - \left(\frac{e_s}{R T} \right)^{(n)} \Delta\tau = \sum_e z_{se} \frac{\mu_e}{R T^{(n)}} - \left(\frac{\mu_s}{R T} \right)^{(n)} \quad (2.28)$$

$$\sum_s \left(\xi_s \frac{e_s}{R T} \right)^{(n)} \Delta\eta_s + \sum_s \left(\xi_s \frac{c_{V,s}}{R} \right)^{(n)} \Delta\tau = \frac{e}{R T^{(n)}} - \sum_s \left(\xi_s \frac{e_s}{R T} \right)^{(n)} \quad (2.29)$$

mit der molaren spezifischen Wärmekapazität

$$c_{V,s} = \frac{de_s}{dT} \quad . \quad (2.30)$$

Eliminiert man $\Delta\eta_s$ aus den Gleichungen (2.27) und (2.29) unter Zuhilfenahme von Gleichung (2.28), reduziert sich die Dimension des linearen Gleichungssystems auf $E + 1$ für $\Delta\tau$ und die E Unbekannten η_e

$$\sum_s z_{es} \xi_s^{(n)} \sum_e z_{es} \frac{\mu_e}{RT^{(n)}} + \sum_s z_{es} \left(\xi_s \frac{e_s}{RT} \right)^{(n)} \Delta\tau = \bar{\xi}_e - \sum_s z_{es} \xi_s^{(n)} \left(\frac{\mu_s}{RT} - 1 \right)^{(n)} \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} \sum_s \left(\xi_s \frac{e_s}{RT} \right)^{(n)} \sum_e z_{es} \frac{\mu_e}{RT^{(n)}} + \sum_s \xi_s^{(n)} \left[\left(\frac{e_s}{RT} \right)^2 + \frac{c_{V,s}}{R} \right]^{(n)} \Delta\tau \\ = \frac{e}{RT^{(n)}} + \sum_s \left(\xi_s \frac{e_s}{RT} \right)^{(n)} \left(\frac{\mu_s}{RT} - 1 \right)^{(n)} . \end{aligned} \quad (2.32)$$

Die Lösungen für $\Delta\eta_s$ ergeben sich dann aus Gleichung (2.28). Um Instabilitäten während des Lösungsprozesses zu vermeiden, wird die Änderung der jeweiligen Größe zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterationsschritten beschränkt:

$$\eta_s^{(n+1)} = \eta_s^{(n)} + \omega_\eta \Delta\eta_s \quad \text{bzw.} \quad \tau^{(n+1)} = \tau^{(n)} + \omega_\tau \Delta\tau \quad . \quad (2.33)$$

Der Relaxationsparameter ω ist für die entsprechende Variable gegeben durch:

$$\omega_\eta = \min \left(1, \frac{5}{\max(|\Delta\eta_s|)} \right) \quad \text{und} \quad \omega_\tau = \min \left(1, \frac{2,3}{|\Delta\tau|} \right) \quad . \quad (2.34)$$

Die Lösung gilt als konvergiert wenn das Abbruchkriterium

$$\max(|\Delta\eta_s|, |\Delta\tau|) \leq 10^{-10} \quad (2.35)$$

erreicht ist.

Abbildungen 2.1 und 2.2 zeigen die Massenanteile der einzelnen Spezies für ein 5 Komponenten Luftgemisch in Abhängigkeit der Temperatur für verschiedene Dichten. Bei niedrigen Temperaturen liegen Stickstoff und Sauerstoff ausschließlich in molekularer Form vor. Mit steigender Temperatur dissoziieren zuerst die Sauerstoff-, dann die Stickstoffmoleküle. Es bildet sich Stickstoffmonoxid, das bei weiter steigender Temperatur wieder zersetzt wird. Bei hohen Temperaturen liegen schließlich nur noch atomare Bestandteile vor. Ein Vergleich der Bilder zeigt den Einfluß der Dichte. Steigt die Dichte des Gemisches, verschiebt sich das Einsetzen der einzelnen Reaktionen hin zu höheren Temperaturen. Die innere Energie ergibt sich aus Gleichung (2.21). Als weitere Zustandsgrößen für das Gemisch ergeben sich der Druck

$$p = \rho RT \sum_s \xi_s \quad , \quad (2.36)$$

die Entropie

$$s = \sum_s \xi_s s_s \quad (2.37)$$

und die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen

$$c_V = \sum_s \xi_s c_{V,s} \quad . \quad (2.38)$$

Zusätzlich werden zur Berechnung der Schallgeschwindigkeit noch die partiellen Ableitungen des Drucks benötigt. Ableiten der Druckgleichung (2.36) nach ρ und e führt nach Einsetzen der abgeleiteten Massenwirkungsgesetze (2.24) auf

$$\frac{\partial p}{\partial \rho} = RT \rho \sum_s \xi_s \sum_e z_{es} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\mu_e}{RT} \right) + (p + \rho e) \frac{\partial \tau}{\partial \rho} \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial p}{\partial e} = RT \rho \sum_s \xi_s \sum_e z_{es} \frac{\partial}{\partial e} \left(\frac{\mu_e}{RT} \right) + (p + \rho e) \frac{\partial \tau}{\partial e} \quad . \quad (2.40)$$

Die Gleichungen zur Bestimmung der unbekannten Ableitungen ergeben sich aus dem nach ρ bzw. e abgeleiteten Gleichungssystem (2.23) bis (2.25). Dieses Gleichungssystem und das Gleichungssystem (2.31) und (2.32) werden durch Invertierung der gleichen Matrix gelöst. Da sämtliche η_s und auch T schon bekannt sind, ist eine Iteration nicht notwendig. Die Schallgeschwindigkeit a ergibt sich damit wie folgt:

$$a = \sqrt{\frac{\partial p}{\partial \rho} + \frac{p}{\rho^2} \frac{\partial p}{\partial e}} \quad . \quad (2.41)$$

Auf die Berechnung der Transportgrößen des Gemisches wird in einem späteren Abschnitt eingegangen.

Da man jede thermodynamische Variable als Funktion von ξ_s , ρ und T darstellen kann, läßt sich das Gleichungssystem für jede beliebige Kombination von zwei gegebenen Zustandsgrößen auf maximal $E + 2$ Gleichungen reduzieren. Das im nächsten Kapitel beschriebene numerische Verfahren zur Berechnung von Strömungsfeldern ist in den konservativen Variablen Dichte und Energie formuliert. Für diesen Fall wurden die Gleichungen zur Berechnung der Gaszusammensetzung im letzten Abschnitt abgeleitet.

2.1.3 Zustandsgrößen und Zustandssummen

Nachdem in den letzten beiden Abschnitten die Gleichungen zur Berechnung des Gleichgewichtszustandes sowie ein Verfahren zur numerischen Lösung dieser Gleichungen beschrieben wurde, werden im folgenden die für dieses Vorgehen benötigten thermischen Zustandsgrößen der Gemischkomponenten berechnet.

Die Zustandsgrößen der einzelnen Komponenten des Gemisches werden mit Hilfe der Zustandssummen ermittelt. Sie stellen den Zusammenhang zwischen dem mikroskopischen Zustand der Atome bzw. Moleküle und dem makroskopischen Zustand des Gesamtsystems her. Die allgemeine Zustandssumme Q eines Einteilchensystems lautet

$$Q = \sum_i g_i e^{-\frac{e_i}{k_B T}} \quad . \quad (2.42)$$

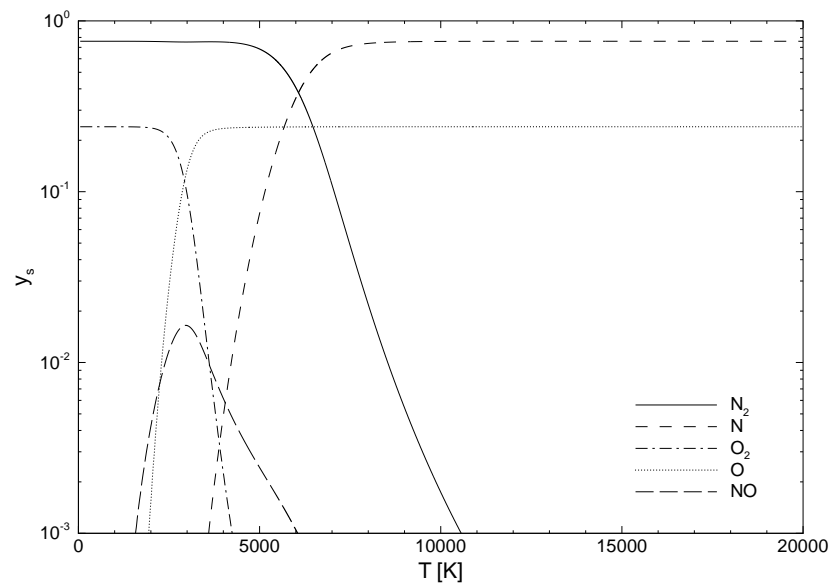


Abbildung 2.1: Gleichgewichtszusammensetzung eines Luftgemisches. Dargestellt sind die Massenanteile der Spezies als Funktion der Temperatur für eine Dichte von $0,001 \text{ kg/m}^3$.

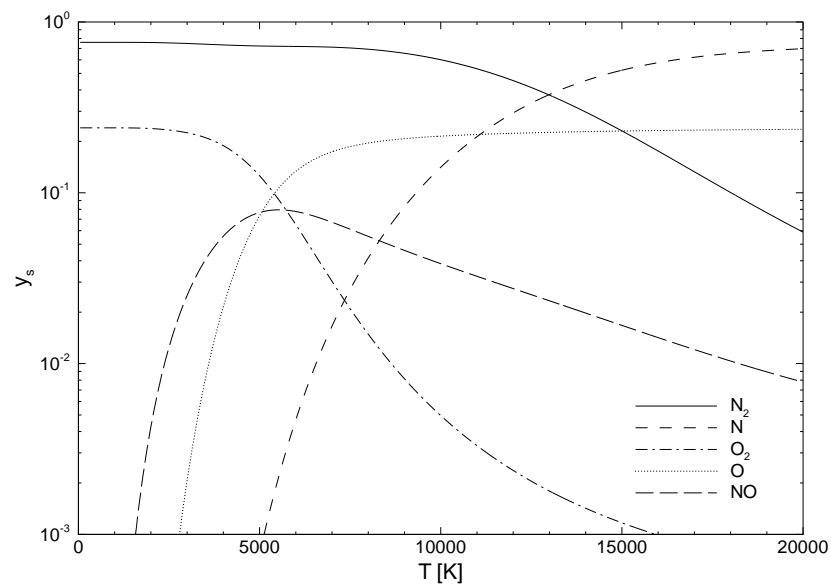


Abbildung 2.2: Gleichgewichtszusammensetzung eines Luftgemisches. Dargestellt sind die Massenanteile der Spezies als Funktion der Temperatur für eine Dichte von 10 kg/m^3 .

Sie ist die Summe aller möglichen Mikrozustände, die das System annehmen kann. g_i ist der Entartungsgrad des i -ten Zustandes und e_i seine Energie. Der Entartungsgrad ist die Anzahl aller Zustände gleicher Energie. Diese Zustände sind nach der Boltzmannstatistik verteilt. Da in der Regel mehrere Quantenzustände zur Bestimmung des Energiezustandes erforderlich sind, kommt dem Index i lediglich eine symbolische Bedeutung zu. Die Zustandssumme Q der Spezies s setzt sich aus einem translatorischen und einem inneren Anteil zusammen

$$Q_s = Q_s^{\text{trans}} Q_s^{\text{inner}} \quad , \quad (2.43)$$

darin ist der translatorische Anteil durch

$$Q_s^{\text{trans}} = V \left(\frac{2\pi m_s k_B T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.44)$$

gegeben. Der innere Anteil läßt sich unter Annahme der Separabilität der Freiheitsgrade in elektronische, rotatorische und vibratorische Anteile zerlegen

$$Q_s^{\text{inner}} = Q_s^{\text{el}} Q_s^{\text{rot}} Q_s^{\text{vib}} Q_s^{\text{k}} Q_s^0 \quad . \quad (2.45)$$

Außerdem können noch Kopplungen zwischen den genannten Teilen eine Rolle spielen und die Wahl des Energienullpunktes ist zu berücksichtigen. Für die hier betrachteten schwach wechselwirkenden Teilchen ist der translatorische Anteil der Zustandssumme eine Funktion des Volumens V und der Temperatur T , während der innere Anteil nur eine Funktion der Temperatur darstellt. D. h. die inneren Freiheitsgrade liefern keinen Beitrag zum Druck des Systems. Enthalpie, Entropie und Wärmekapazität bei konstantem Volumen ergeben sich aus den Zustandssummen nach Vincenti und Kruger [55] gemäß:

$$h_s = N_A k_B T \left(T \frac{\partial \ln Q_s}{\partial T} + 1 \right) \quad (2.46)$$

$$s_s = N_A k_B \left(\ln \frac{Q_s}{N_A} + 1 + T \frac{\partial \ln Q_s}{\partial T} \right) \quad (2.47)$$

$$c_{V,s} = \frac{\partial}{\partial T} \left(N_A k_B T^2 \frac{\partial \ln Q_s}{\partial T} \right) \quad . \quad (2.48)$$

Für den translatorischen Teil ergibt sich somit eine Enthalpie von

$$h_s^{\text{trans}} = \frac{5}{2} N_A k_B T = \frac{5}{2} R T \quad . \quad (2.49)$$

Für die absolute translatorische Entropie ergibt sich die Sackur-Tetrode Gleichung

$$s_s^{\text{trans}} = \frac{5}{2} R \ln T - R \ln p + R \left\{ \ln \left[\left(\frac{2\pi m_s}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} k_B^{\frac{5}{2}} \right] + \frac{5}{2} \right\} \quad (2.50)$$

und für die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen

$$c_{V,s}^{\text{trans}} = \frac{3}{2} R \quad . \quad (2.51)$$

Unter den hier gemachten Voraussetzungen setzen sich die extensiven Zustandsgrößen des Gemisches aus den Summen der Zustandsgrößen der einzelnen Komponenten zusammen, die bei bekannter Zusammensetzung aus den entsprechenden Zustandssummen berechnet werden können.

Die Zustandssumme Q_s bezieht sich auf den Grundzustand eines ruhenden Teilchens. Dieser ist für jede Komponente verschieden. Die Kopplung der einzelnen Komponenten durch chemische Reaktionen macht jedoch die Definition eines gemeinsamen Bezugspunktes für die Energie notwendig. Die Wahl dieses sogenannten Energienullpunktes ist willkürlich. Im vorliegenden Fall wurde der Ruhezustand der Stickstoff- und Sauerstoffmoleküle N_2 und O_2 als Nullpunkt gewählt, was das Auftreten negativer Energien verhindert. Die Nullpunktsenergie e^0 der atomaren Bestandteile N und O entspricht dann der halben Dissoziationsenergie der jeweiligen Moleküle. Die Zustandssumme für den so gewählten Energienullpunkt lautet

$$Q_s^0 = e^{\frac{\theta_s^0}{T}} \quad (2.52)$$

mit der charakteristischen Temperatur

$$\theta_s^0 = \frac{e_s^0}{k_B} \quad . \quad (2.53)$$

Atomare Komponenten

Bei atomaren Komponenten existiert neben der Translation als einziger innerer Freiheitsgrad die elektronische Anregung. Er ist allein durch die Elektronenkonfiguration des Atoms bestimmt. Die zugehörige Zustandssumme für die Spezies s lautet

$$Q_s^{\text{inner}} = Q_{s,i}^{\text{el}} = \sum_i g_{s,i} e^{-\frac{\theta_{s,i}^{\text{el}}}{T}} \quad (2.54)$$

mit

$$\theta_{s,i}^{\text{el}} = \frac{e_{s,i}^{\text{el}}}{k_B} \quad . \quad (2.55)$$

Dabei wird über alle Elektronenzustände i summiert. g_i bezeichnet den Entartungsgrad, θ_i^{el} die charakteristische Elektronentemperatur und e_i^{el} die Energie des i -ten Elektronenzustandes. Die innere Energie ist durch die Ionisationsenergie beschränkt. Um dies zu gewährleisten, ist die Summation über die theoretisch unendlich vielen Zustände an geeigneter Stelle abzubrechen. Außerdem tragen bei moderaten Temperaturen höhere Anregungszustände nur einen kleinen Teil zur Zustandssumme bei. Mit

$$\Xi_{s,j} = \sum_i g_{s,i} \left(\frac{\theta_{s,i}^{\text{el}}}{T} \right)^j e^{-\frac{\theta_{s,i}^{\text{el}}}{T}} \quad (2.56)$$

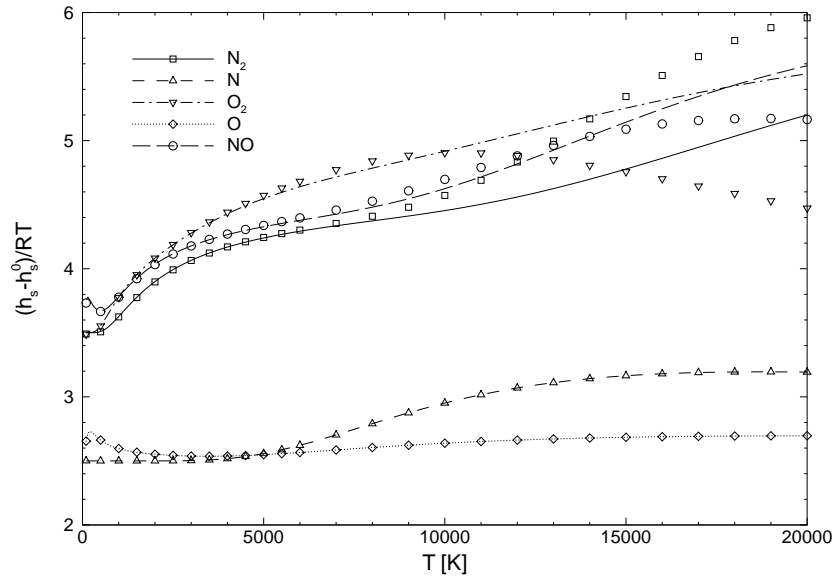


Abbildung 2.3: Vergleich der dimensionslosen Enthalpie der Spezies ohne die Nullpunktsenthalpie mit tabellierten Werten von Gurvich et al. [17]. Die Daten von Gurvich et al. sind als Punkte, die nach dem vorgestellten Verfahren berechneten Werte als Linien dargestellt.

ergeben sich die Beiträge aufgrund innerer Freiheitsgrade zur Enthalpie, Entropie und spezifische Wärmekapazität gemäß Gleichung (2.46), (2.47) bzw. (2.48) wie folgt:

$$h_s^{\text{inner}} = RT \left(\frac{\Xi_{s,1}}{\Xi_{s,0}} + 1 \right) \quad (2.57)$$

$$s_s^{\text{inner}} = R \left[\ln \left(\frac{\Xi_{s,0}}{N_A} \right) + \frac{\Xi_{s,1}}{\Xi_{s,0}} + 1 \right] \quad (2.58)$$

$$c_{V,s}^{\text{inner}} = R \left[\frac{\Xi_{s,2}}{\Xi_{s,0}} - \left(\frac{\Xi_{s,1}}{\Xi_{s,0}} \right)^2 \right] \quad (2.59)$$

Molekulare Komponenten

Der innere Zustand molekularer Teilchen hängt neben der Elektronenkonfiguration noch von Rotations- und Vibrationsfreiheitsgraden der Moleküle sowie der Kopplung zwischen diesen Termen ab. Analog zur Gleichung (2.54) ergibt sich die Zustandssumme der elektronischen Anregung für molekulare Teilchen

$$Q_{s,i}^{\text{el}} = \sum_i g_{s,i} e^{-\frac{\theta_{s,i}^{\text{el}}}{T}} \quad (2.60)$$

Die Elektronentemperatur wird allerdings um einen Term, der die Kopplung zwischen elektronischer und Vibrationsanregung berücksichtigt, erweitert

$$\theta_{s,i}^{\text{el}} = \frac{e_{s,i}^{\text{el}}}{k_B} + \frac{\theta_{s,i}^{\text{vib}} - \theta_{s,0}^{\text{vib}}}{2} - \frac{\theta_{s,i}^{\text{anh}} - \theta_{s,0}^{\text{anh}}}{4} \quad . \quad (2.61)$$

Für die Rotationsfreiheitsgrade ergibt sich die Zustandssumme unter Berücksichtigung der Tatsache, daß Rotation und Vibration keine unabhängigen Bewegungsformen sind

$$Q_s^{\text{rot}} = \frac{1}{\sigma_s} \sum_i \frac{T}{\theta_{s,i}^{\text{rot}} - \theta_{s,i}^{\text{rv}}} \quad . \quad (2.62)$$

Die Zustandssumme für die Vibrationsfreiheitsgrade setzt sich aus harmonischen und anharmonischen Anteilen zusammen

$$Q_s^{\text{vib}} = \sum_i \frac{1}{1 - e^{-u_{s,i}}} \quad (2.63)$$

mit

$$u_{s,i} = \frac{\theta_{s,i}^{\text{vib}} - 2\theta_{s,i}^{\text{anh}}}{T} \quad . \quad (2.64)$$

Ursache der Anharmonizität ist das molekulare Potential, welches nur für kleine Anregungszustände als Parabel angesehen werden darf. Außerdem ergibt sich ein zusätzlicher Kopplungsterm.

$$Q_s^{\text{k}} = \sum_i \left[1 + 8 \frac{\theta_{s,i}^{\text{rot}}}{u_{s,i} \theta_{s,i}^{\text{vib}}} + \frac{\theta_{s,i}^{\text{rv}}}{\theta_{s,i}^{\text{rot}}} \frac{1}{e^{u_{s,i}} - 1} + \frac{\theta_{s,i}^{\text{anh}}}{\theta_{s,i}^{\text{vib}}} \frac{u_{s,i} (e^{u_{s,i}} + 1)}{(e^{u_{s,i}} - 1)^2} \right] \quad (2.65)$$

Wendet man auf die einzelnen Zustandssummen Gleichung (2.46), (2.47) und (2.48) an, ergeben sich der Anteil der Enthalpie, Entropie und Wärmekapazität aufgrund der inneren Anregungszustände der molekularen Komponenten wie folgt:

$$h_s^{\text{inner}} = RT \left\{ \frac{1}{Q_s^{\text{inner}}} \sum_i Q_{s,i}^{\text{inner}} \left[\frac{\theta_{s,i}^{\text{el}}}{T} + 1 + \Pi_{s,3} + \frac{\Pi_{s,1}}{Q_{s,i}^{\text{k}}} \right] + 1 \right\} \quad (2.66)$$

$$s_s^{\text{inner}} = R \left\{ \ln \frac{Q_s^{\text{inner}}}{N_A} + 1 + \frac{1}{Q_s^{\text{inner}}} \sum_i Q_{s,i}^{\text{inner}} \left[\frac{\theta_{s,i}^{\text{el}}}{T} + 1 + \Pi_{s,3} + \frac{\Pi_{s,1}}{Q_{s,i}^{\text{k}}} \right] \right\} \quad (2.67)$$

$$c_{V,s}^{\text{inner}} = \frac{h_s^{\text{inner}} - RT}{T} \left(2 - \frac{h_s^{\text{inner}}}{RT} \right) + \frac{R}{Q_s^{\text{inner}}} \sum_i Q_{s,i}^{\text{inner}} \left\{ \left(\frac{\theta_{s,i}^{\text{el}}}{T} + 1 + \Pi_{s,3} + \frac{\Pi_{s,1}}{Q_{s,i}^{\text{k}}} \right)^2 - \frac{\theta_{s,i}^{\text{el}}}{T} + \Pi_{s,4} + \frac{\Pi_{s,2}}{Q_{s,i}^{\text{k}}} - \left(\frac{\Pi_{s,1}}{Q_{s,i}^{\text{k}}} \right)^2 \right\} \quad (2.68)$$

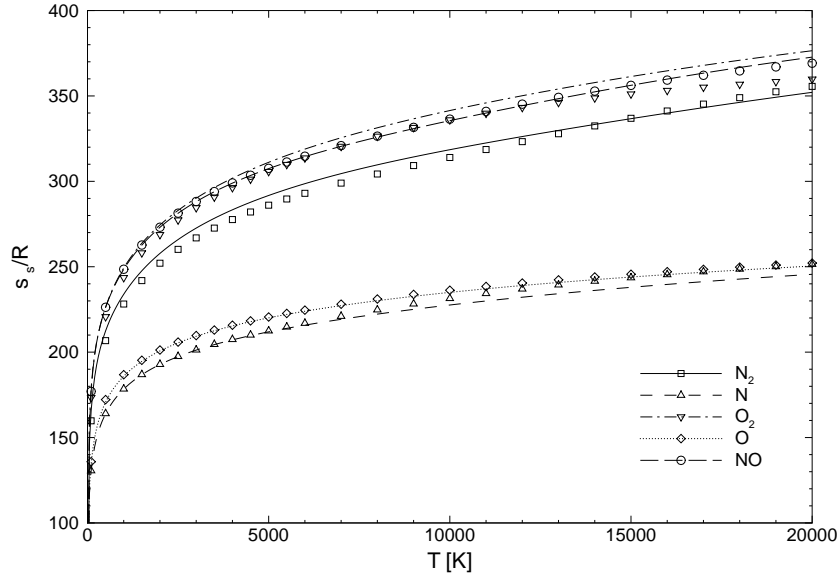


Abbildung 2.4: Vergleich der dimensionslosen Entropie der Spezies mit tabellierten Werten von Gurvich et al. [17]. Die Daten von Gurvich et al. sind als Punkte, die nach dem vorgestellten Verfahren berechneten Werte als Linien dargestellt.

mit den Hilfsvariablen

$$\Pi_{s,1} = 8 \frac{\theta_{s,i}^{\text{rot}}}{u_{s,i} \theta_{s,i}^{\text{vib}}} + \frac{\theta_{s,i}^{\text{rv}}}{\theta_{s,i}^{\text{rot}}} \frac{u_{s,i} e^{u_{s,i}}}{(e^{u_{s,i}} - 1)^2} + \frac{\theta_{s,i}^{\text{anh}}}{\theta_{s,i}^{\text{vib}}} u_{s,i} \frac{(u_{s,i} - 1) e^{2u_{s,i}} + 3u_{s,i} e^{u_{s,i}} + 1}{(e^{u_{s,i}} - 1)^3} \quad (2.69)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{s,2} = 8 \frac{\theta_{s,i}^{\text{rot}}}{u_{s,i} \theta_{s,i}^{\text{vib}}} + \frac{u_{s,i}}{(e^{u_{s,i}} - 1)^3} \left\{ \frac{\theta_{s,i}^{\text{rv}}}{\theta_{s,i}^{\text{rot}}} e^{u_{s,i}} [e^{u_{s,i}} (u_{s,i} - 1) + u_{s,i} + 1] \right. \\ \left. + \frac{\theta_{s,i}^{\text{anh}}}{\theta_{s,i}^{\text{vib}}} \left[\frac{(u_{s,i}^2 - 3u_{s,i} + 1) e^{3u_{s,i}}}{(e^{u_{s,i}} - 1)} + \frac{(8u_{s,i}^2 - 6u_{s,i} - 1) e^{2u_{s,i}}}{(e^{u_{s,i}} - 1)} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{(3u_{s,i}^2 - 9u_{s,i} - 1) e^{u_{s,i}} + 1}{(e^{u_{s,i}} - 1)} \right] \right\} \quad (2.70) \end{aligned}$$

$$\Pi_{s,3} = \frac{u_{s,i}}{e^{u_{s,i}} - 1} \quad (2.71)$$

$$\Pi_{s,4} = u_{s,i} \frac{e^{u_{s,i}} (u_{s,i} - 1) + 1}{(e^{u_{s,i}} - 1)^2} \quad (2.72)$$

Die Abbildungen 2.3, 2.4 und 2.5 zeigen einen Vergleich der Enthalpien, Entropien bzw. der spezifischen Wärmekapazität der Spezies, die sich aus dem in der vorliegenden Arbeit verwendeten Modell ergeben, mit den von Gurvich et al. [17] tabellierten Daten. Da Gurvich et al. nur die Wärmekapazität bei konstantem Druck angeben, wurde diese für den Vergleich aus der Wärmekapazität bei konstantem Volumen berechnet. Die ab 10000 K auf-

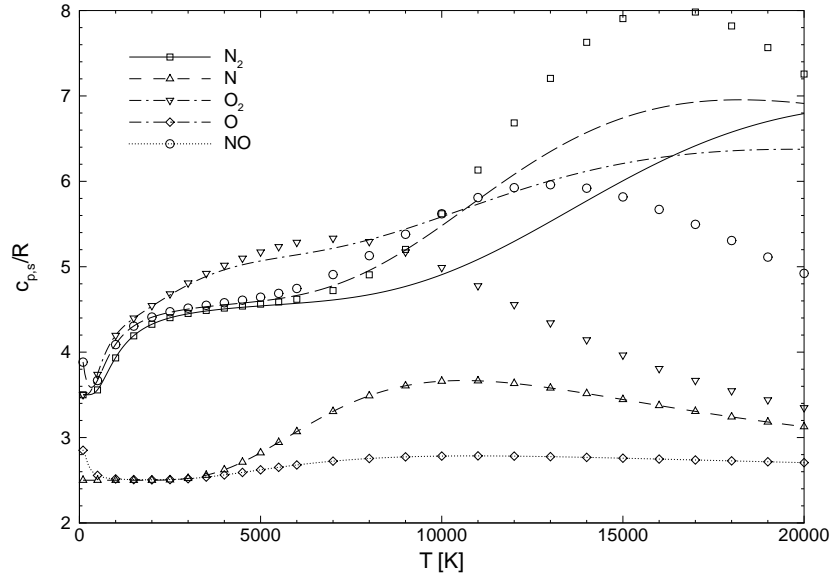


Abbildung 2.5: Vergleich der dimensionslosen Wärmekapazität bei konstantem Druck der Spezies mit tabellierten Werten von Gurvich et al. [17]. Die Daten von Gurvich et al. sind als Punkte, die nach dem vorgestellten Verfahren berechneten Werte als Linien dargestellt.

tre tenden Unterschiede für die molekularen Spezies sind auf die größere Anzahl der von Gurvich et al. berücksichtigten elektronischen Anregungszustände zurückzuführen. Für den Temperaturbereich des in Kapitel 5 untersuchten Strömungsfeldes sind die gemachten Annahmen ausreichend. Das Modell kann aber mit den entsprechenden Speziesdaten leicht um höhere Anregungszustände erweitert werden. Ein Modell mit einer Vielzahl von Zuständen wird von Bottin [3] gegeben. Die verwendeten Konstanten zur Berechnung der thermodynamischen Größen finden sich im Anhang A der vorliegenden Arbeit.

2.2 Berechnung der Transportgrößen

Neben den bereits im vorhergegangenen Abschnitt berechneten thermodynamischen Zustandsvariablen werden im nächsten Abschnitt die zur vollständigen Beschreibung des Gases erforderlichen Größen für den Transport von Impuls (Viskosität), Energie (Wärmeleitfähigkeit) und Masse (Diffusivität) berechnet.

2.2.1 Viskosität

Zur Beschreibung der Viskositäten der einzelnen Spezies μ_s werden von Gupta et al. [16] beschriebene Funktionen verwendet:

$$\mu_s = \frac{1}{10} e^{C_s^\mu} T^{(A_s^\mu \ln T + B_s^\mu)} \quad T > T_{g,s}^\mu \quad . \quad (2.73)$$

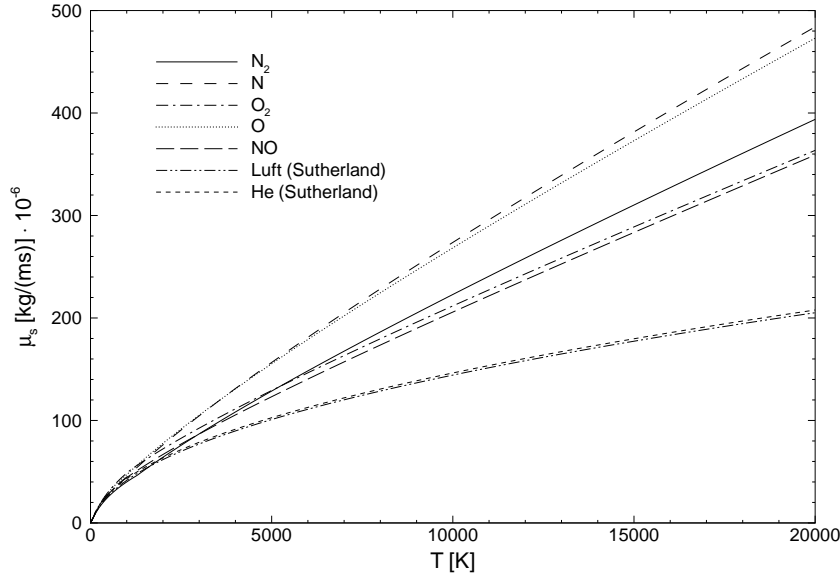


Abbildung 2.6: Viskosität der einzelnen Spezies als Funktion der Temperatur.

Der Gültigkeitsbereich dieser Approximationen erstreckt sich von ca. 1000 bis 30000 K. Für den Temperaturbereich unterhalb der Temperatur $T_{g,s}^\mu$ wird für alle Spezies die Formel von Sutherland angewendet

$$\mu_s = \mu_s^0 \left(\frac{T}{T_{0,s}^\mu} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{T_{0,s}^\mu + S_s^\mu}{T + S_s^\mu} \right) \quad T \leq T_{g,s}^\mu \quad . \quad (2.74)$$

$T_{g,s}^\mu$ wurde so gewählt, dass beide Formulierungen bei dieser Temperatur den gleichen Wert ergeben. Die Viskosität des Gemisches μ wird aus den Viskositäten der Spezies und den spezifischen Stoffmengen ξ_s unter den gegebenen Bedingungen mit Hilfe der Mischungsregel von Wilke [59] ermittelt:

$$\mu = \sum_{s'} \frac{\xi_{s'} \mu_{s'}}{\sum_s \xi_s \Phi_{s',s}} \quad (2.75)$$

mit

$$\Phi_{s',s} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_{s'}}{M_s} \right)^{-\frac{1}{2}} \left[1 + \left(\frac{\mu_{s'}}{\mu_s} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_s}{M_{s'}} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2 \quad . \quad (2.76)$$

Abbildung 2.6 zeigt die Viskositäten der Spezies in Abhängigkeit der Temperatur, Abbildung 2.7 die Viskosität des Gemisches in Abhängigkeit der Temperatur für verschiedene Dichten. Zum Vergleich sind die Werte für die Idealgase Luft¹ und Helium dargestellt.

¹Betrachtet man Luft als Idealgas ist seine Struktur ohne Bedeutung.

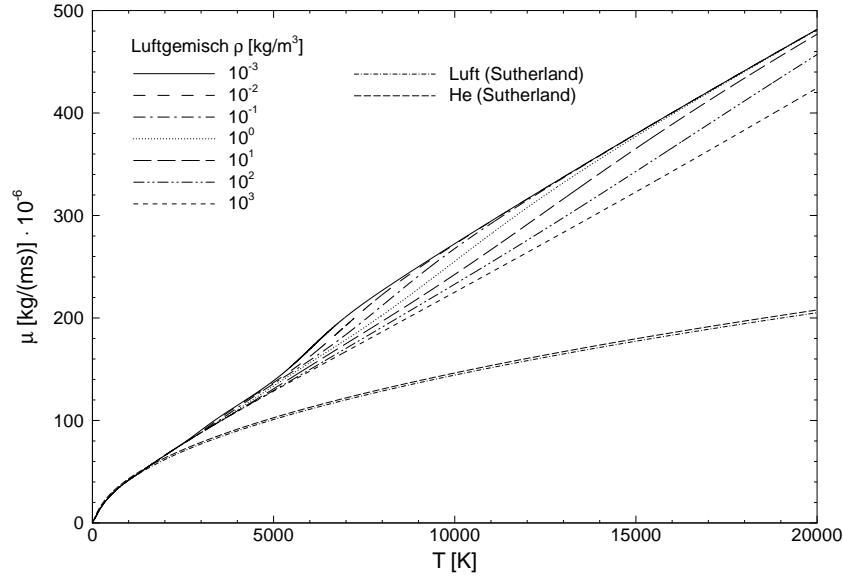


Abbildung 2.7: Viskosität des Gemisches bei verschiedenen Dichten als Funktion der Temperatur.

2.2.2 Wärmeleitung

Die Wärmeleitkoeffizienten für die einzelnen Spezies κ_s werden von Gupta et al. [16] wie folgt gegeben:

$$\kappa_s = 418,68 e^{E_s^\kappa} T^{A_s^\kappa (\ln T)^3 + B_s^\kappa (\ln T)^2 + C_s^\kappa \ln T + D_s^\kappa} \quad T > T_{g,s}^\kappa \quad . \quad (2.77)$$

Unterhalb der Temperatur $T_{g,s}^\kappa$ wird wieder die Sutherland Formel angewendet

$$\kappa_s = \kappa_s^0 \left(\frac{T}{T_{0,s}^\kappa} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{T_{0,s}^\kappa + S_s^\kappa}{T + S_s^\kappa} \right) \quad T \leq T_{g,s}^\kappa \quad . \quad (2.78)$$

Mit den spezifischen Stoffmengen ergibt sich für das Gemisch eine gefrorene Wärmeleitfähigkeit κ_f nach der Mischungsregel von Zipperer und Herning [61]

$$\kappa_f = \sum_s \frac{\xi_s \kappa_s}{\Phi_s} \quad (2.79)$$

mit

$$\Phi_s = \sum_{s'} \xi_{s'} \sqrt{\frac{M_{s'}}{M_s}} \quad . \quad (2.80)$$

Die Gesamtwärmeleitfähigkeit κ setzt sich als Summe aus dem gefrorenen Anteil und einem reaktiven Anteil, der unter Annahme einer konstanten Schmidtzahl von $Sc = 0,7$ Diffusion aufgrund von Konzentrationsgradienten berücksichtigt, zusammen

$$\kappa = \kappa_f + \frac{\mu}{Sc} \sum_s h_s \frac{\partial \xi_s}{\partial T} \quad . \quad (2.81)$$

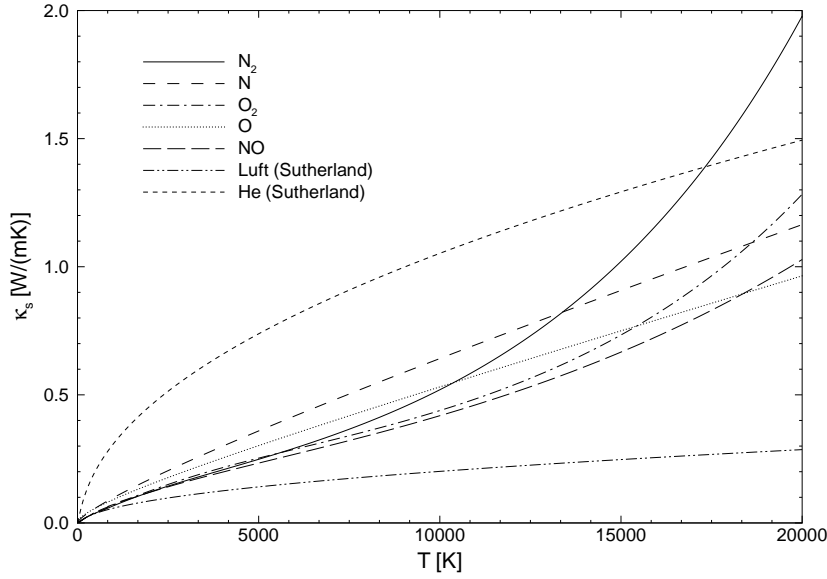


Abbildung 2.8: Wärmeleitfähigkeit der einzelnen Spezies als Funktion der Temperatur.

Abbildung 2.8 zeigt die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Temperatur für die Einzelspezies, Abbildung 2.9 für ein Luftgemisch bei verschiedenen Dichten. Für die Idealgase Luft und Helium wurde die Wärmeleitfähigkeit aus der Viskosität gemäß

$$\kappa = \frac{\mu c_p}{Pr} \quad (2.82)$$

mit konstanter Prandtlzahl $Pr = 0,72$ berechnet. Sämtliche Konstanten zur Berechnung von Viskosität und Wärmeleitfähigkeit sind im Anhang A tabelliert.

2.3 Bilineare Interpolation

Da die Lösung der in den letzten beiden Abschnitten beschriebenen Gleichungen zur Bestimmung der Zustands- und Transportgrößen in einer strömungsmechanischen Simulation sehr teuer ist, werden die entsprechenden Zustände zunächst nur an vergleichsweise wenigen Stützstellen eines den Zustand des Strömungsfeldes abdeckenden Bereichs berechnet. Während der strömungsmechanischen Simulation ermöglicht dann eine Interpolation zwischen den gespeicherten Stützstellen ein schnelles Auffinden der entsprechenden Lösung. Zur Berechnung der Stützstellen werden die Intervalle $[e_{\min}, e_{\max}] \times [\rho_{\min}, \rho_{\max}]$ mit $N \times M$ Punkten diskretisiert. Da die stärksten Änderungen der Gleichgewichtszusammensetzung für den untersuchten Energiebereich bei kleinen Dichte auftreten, wird für die Stützstellen eine logarithmische Verteilung des Dichtebereichs gewählt. Bezogen auf die Energie werden die Stützstellen linear verteilt. Die Stützstellen ergeben sich aus

$$\begin{aligned} \rho_i &= \rho_{\min} + e^{i \Delta \ln \rho} & i &= 0, \dots, N \\ e_j &= e_{\min} + j \Delta e & j &= 0, \dots, M \end{aligned} \quad (2.83)$$

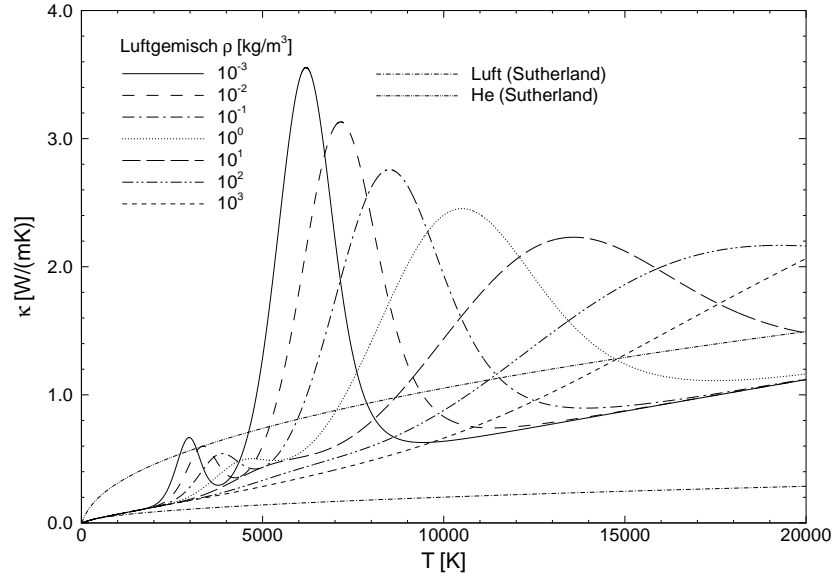


Abbildung 2.9: Wärmeleitfähigkeit des Gemisches bei verschiedenen Dichten als Funktion der Temperatur.

mit

$$\begin{aligned}\Delta \ln \rho &= e^{\frac{\ln \rho_{\max} - \ln \rho_{\min}}{N}} \\ \Delta e &= \frac{e_{\max} - e_{\min}}{M}.\end{aligned}\quad (2.84)$$

Zu jedem Tupel (ρ_i, e_j) wird der Gleichgewichtszustand berechnet und abgespeichert. Aus diesem Datensatz kann dann zu jedem beliebigen Zustand (ρ, e) mit

$$\rho_i < \rho < \rho_{i+1} \quad (2.85)$$

$$e_j < e < e_{j+1} \quad (2.86)$$

die Größe $\phi(\rho, e)$ aus den Werten der sie umgebenden Stützstellen interpoliert werden. Sei $\phi_{i,j} = \phi(\rho_i, e_j)$, so ergibt sich die Formel für die bilineare Interpolation wie folgt:

$$\begin{aligned}\phi(\rho, e) &= \frac{(\rho_{i+1} - \rho)(e_{j+1} - e)\phi_{i,j} + (\rho - \rho_i)(e_{j+1} - e)\phi_{i+1,j}}{(\rho_{i+1} - \rho_i)(e_{j+1} - e_j)} \\ &\quad + \frac{(\rho_{i+1} - \rho)(e - e_j)\phi_{i,j+1} + (\rho - \rho_i)(e - e_j)\phi_{i+1,j+1}}{(\rho_{i+1} - \rho_i)(e_{j+1} - e_j)}\end{aligned}\quad (2.87)$$

Die vollständige Beschreibung umfaßt die thermodynamischen Größen

$$p = p(\rho_i, e_j), \quad T = T(\rho_i, e_j), \quad c_V = c_V(\rho_i, e_j), \quad s = s(\rho_i, e_j),$$

die zur Berechnung der Schallgeschwindigkeit benötigten Ableitungen

$$\frac{\partial p}{\partial \rho} = \frac{\partial p}{\partial \rho}(\rho_i, e_j), \quad \frac{\partial p}{\partial e} = \frac{\partial p}{\partial e}(\rho_i, e_j),$$

die Transportgrößen

$$\mu = \mu(\rho_i, e_j), \quad \kappa = \kappa(\rho_i, e_j)$$

und die Massenanteile der Spezies

$$\begin{aligned} y_N &= n_N(\rho_i, e_j), & y_O &= n_O(\rho_i, e_j) \\ y_{N_2} &= n_{N_2}(\rho_i, e_j), & y_{O_2} &= n_{O_2}(\rho_i, e_j), & y_{NO} &= n_{NO}(\rho_i, e_j). \end{aligned}$$

Nicht immer sind während der Strömungssimulation in jeder Netzzelle die konservativen Variablen Dichte und Energie bekannt. Dies gilt insbesondere für die Randbedingungen, so kann beispielsweise für eine isotherme Wand die Wandtemperatur oder für einen Ein- bzw. Ausströmrand der Druck gegeben sein. Da die Interpolation der Werte auf verschiedenen Zustandsflächen nicht konsistent ist, d. h. im allgemeinen aus

$$\begin{aligned} p_2 &= p_2(\rho_1, e_1) \quad \text{mit} \quad e_1 = e_1(\rho_1, p_1) \\ p_2 &\neq p_1 \end{aligned} \tag{2.88}$$

folgt, wird für diese Fälle eine Iteration auf den (ρ, e) -Zustandsflächen durchgeführt. Als Startwerte für diese Iterationen dienen zusätzliche Flächen der Form

$$e = e(\rho_k, T_l), \quad e = e(\rho_m, p_n), \quad \rho = \rho(h_p, s_q), \quad e = e(h_p, s_q) \quad .$$

Dieses Vorgehen minimiert zwar den Speicheraufwand, führt aber aufgrund der zusätzlichen Iterationen zu einem höheren Rechenaufwand. Die Abbildungen 2.10 und 2.11 zeigen beispielhaft die Zustandsflächen für Temperatur, Druck, Wärmeleitfähigkeit und Massenanteil von Stickstoffmonoxid als Funktion von Dichte und innerer Energie. Der Dichtebereich von 0,0001 bis 4000 kg/m³ ist mit 1200, der Energiebereich mit 600 Punkten diskretisiert. Minimale und maximale Energie sind so gewählt, daß für jede Dichte ein Temperaturbereich von 50 bis 30000 K abgedeckt wird. Dargestellt ist jede zehnte Stützstelle.

Für den Bereich hoher Dichte bei niedriger Temperatur ist die gemachten Voraussetzung schwacher Wechselwirkung der Teilchen untereinander nicht mehr erfüllt. Die Wahl des Wertebereichs erfolgt aufgrund der numerischen Konsistenz. Er ist nicht physikalisch und für die betrachteten Strömungsfelder nicht relevant.

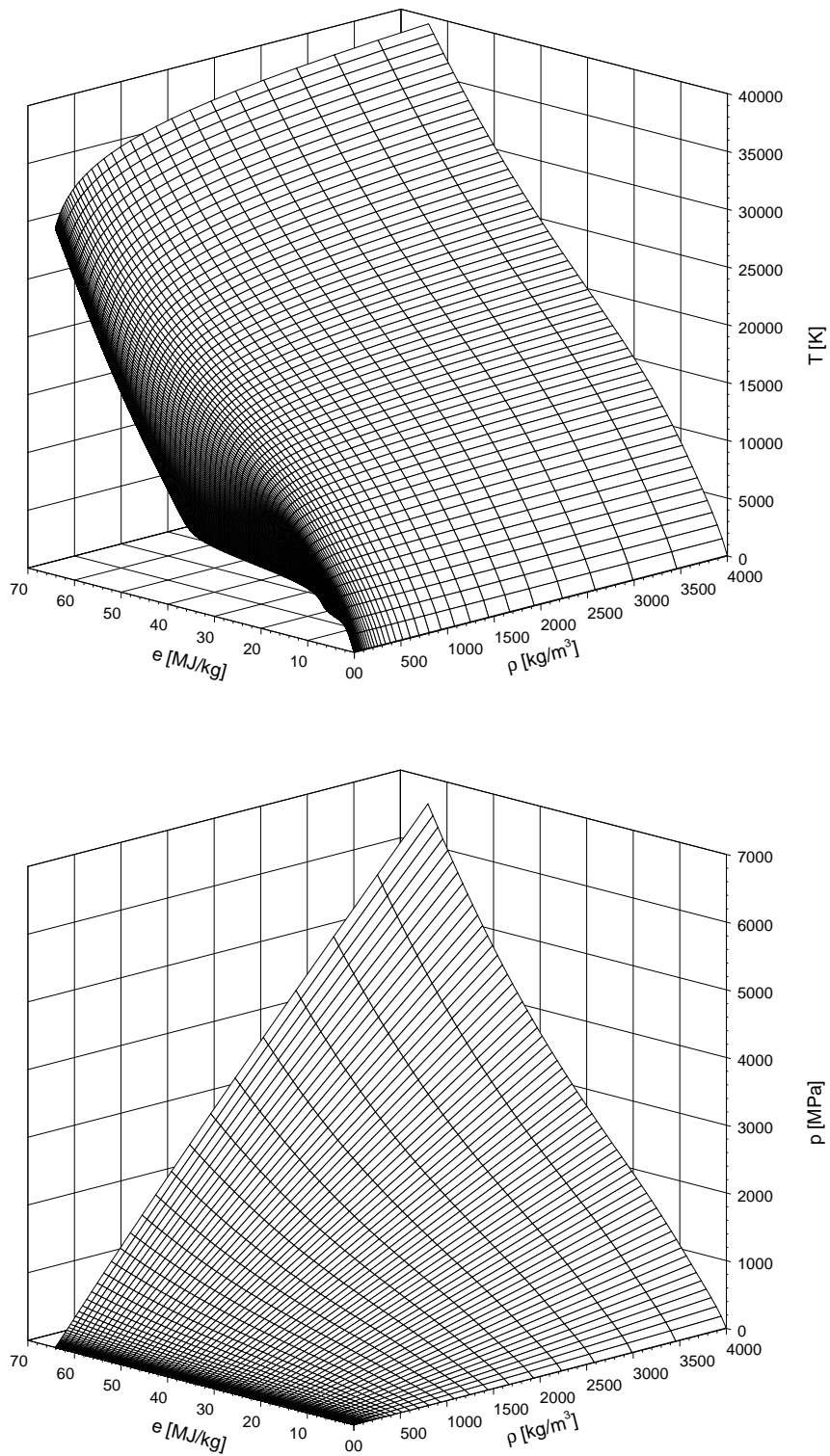


Abbildung 2.10: Interpolationsflächen der Temperatur und des Drucks als Funktion der Dichte und der inneren Energie.

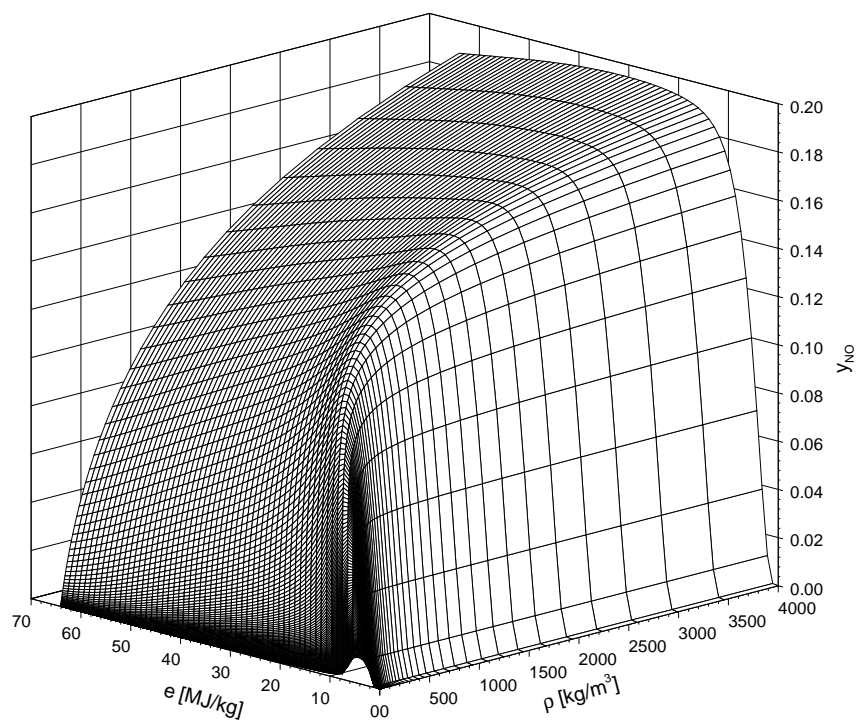
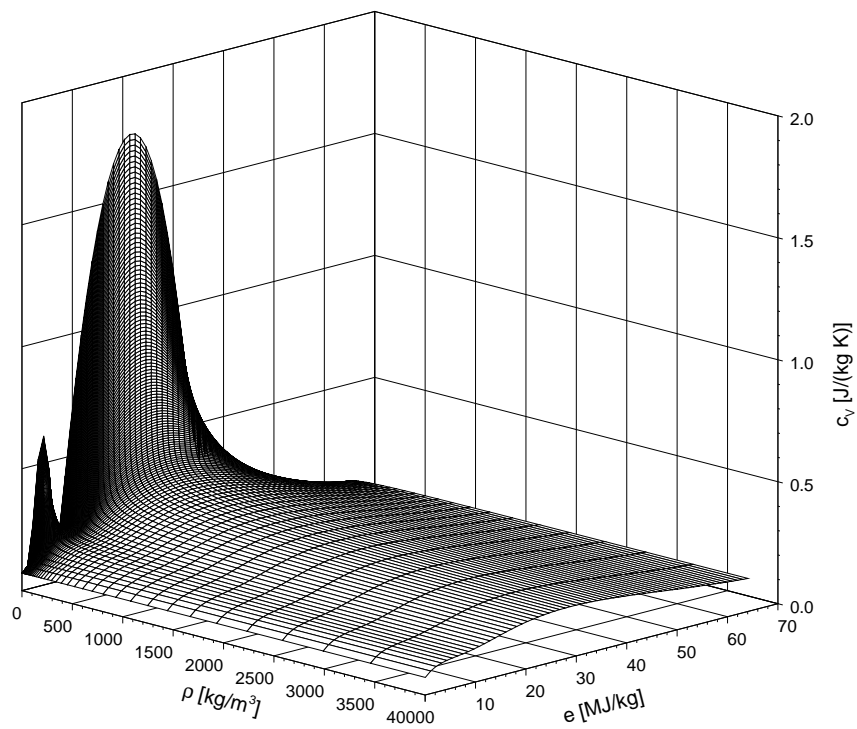


Abbildung 2.11: Interpolationsflächen der spezifischen Wärmekapazität und des Massenanteils von Stickstoffmonoxid (NO) als Funktion der Dichte und der inneren Energie.

3 Numerisches Verfahren

Das verwendete und im folgenden beschriebene numerische Verfahren basiert auf dem seit mehreren Jahren im Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. entwickelten TAU-Code [9, 46]. Dabei handelt es sich um ein dreidimensionales Finite-Volumen Verfahren zur Lösung der Euler- bzw. der Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen¹ (RANS) auf strukturierten, unstrukturierten und hybriden Netzen. Das Verfahren ist sowohl für Unter- und Transschall- [14] als auch Über- und Hyperschallströmungen [29, 28, 43] validiert.

3.1 Grundgleichungen

Bei der Mittelung nach Reynolds wird jede physikalische Größe ϕ in einen Mittelwert $\bar{\phi}$ und eine Fluktuation ϕ' zerlegt

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \bar{\phi}(\mathbf{x}, t) + \phi'(\mathbf{x}, t) \quad (3.1)$$

mit dem Ensemblemittelwert

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi^{(i)}(\mathbf{x}, t) \quad . \quad (3.2)$$

N entspricht der Anzahl der Messungen und $\phi^{(i)}$ der i -ten Messung der physikalischen Größe ϕ . Diese im Gegensatz zur zeitlichen oder räumlichen Mittelung allgemeinere Art der Mittelwertbildung ermöglicht auch die Betrachtung instationärer Vorgänge.

Betrachtet man kompressible Strömungen, ergeben sich zahlreiche Vereinfachungen durch die Einführung massengemittelter Größen der Form

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \tilde{\phi}(\mathbf{x}, t) + \phi''(\mathbf{x}, t) \quad (3.3)$$

mit dem Favre-Mittelwert $\tilde{\phi}$ und der Fluktuation ϕ''

$$\tilde{\phi} = \frac{\bar{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \quad . \quad (3.4)$$

Druck p und Dichte ρ brauchen nicht massengemittelt zu werden. Für inkompressible Strömungen sind Reynolds- und Favre-Mittelung identisch.

¹Unter Navier-Stokes Gleichungen wird hier das Gleichungssystem aus den Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie verstanden.

Betrachtet man ein beliebiges zeitunabhängiges Kontrollvolumen $V \subset \mathbb{R}^3$ mit der Berandung $\Omega = \partial V$ ergibt sich die Integralform der Navier-Stokes Gleichungen unter Vernachlässigung sämtlicher Volumenkräfte und Quellterme in konservativer Form

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \tilde{\mathbf{w}} \, dV = - \iint_{\Omega} \tilde{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{n} \, d\Omega \quad . \quad (3.5)$$

\mathbf{n} bezeichnet den nach außen gerichteten Normalenvektor der Berandung und $\tilde{\mathbf{w}}$ den Vektor der gemittelten Erhaltungsgrößen bestehend aus den Partialdichten $\bar{\rho}_s$, dem Impuls $\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}$ und der Energie $\bar{\rho}\tilde{E}$

$$\tilde{\mathbf{w}} = \begin{pmatrix} \bar{\rho}_s \\ \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}} \\ \bar{\rho}\tilde{E} \end{pmatrix} \quad . \quad (3.6)$$

Die Gesamtdichte ergibt sich als Summe der Partialdichten

$$\bar{\rho} = \sum_s \bar{\rho}_s \quad . \quad (3.7)$$

\tilde{E} bezeichnet die auf das Volumen bezogene Gesamtenergie als Summe aus innerer und kinetischer Energie des Fluids

$$\tilde{E} = \tilde{e} + \frac{1}{2} |\tilde{\mathbf{u}}|^2 \quad . \quad (3.8)$$

Der Flußdichtetensor $\tilde{\mathbf{F}}$ ergibt sich als Summe der dyadischen Produkte der Flußdichtevektoren mit den zugehörigen Einheitsvektoren des kartesischen Koordinatensystems

$$\tilde{\mathbf{F}} = \sum_k \tilde{\mathbf{F}}_k \mathbf{e}_k \quad . \quad (3.9)$$

Die Flußdichtevektoren lassen sich in einen konvektiven und einen dissipativen Anteil aufspalten

$$\tilde{\mathbf{F}}_k = \tilde{\mathbf{F}}_k^{\text{konv}} + \tilde{\mathbf{F}}_k^{\text{diss}}, \quad (3.10)$$

die sich folgendermaßen ergeben:

$$\tilde{\mathbf{F}}_k^{\text{konv}} = \begin{pmatrix} \bar{\rho}_s \tilde{u}_k \\ \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_k + \bar{p} \delta_{ik} \\ \bar{\rho} \tilde{H} \tilde{u}_k \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

$$\tilde{\mathbf{F}}_k^{\text{diss}} = - \begin{pmatrix} \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\bar{\rho}_s}{\bar{\rho}} \\ \tilde{\tau}_{ik} - \overline{\rho u_i'' u_k''} \\ \sum_i \tilde{u}_i \tilde{\tau}_{ik} + \sum_i \overline{u_i'' \tau_{ik}} + \kappa \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_k} - \overline{\rho H'' u_k''} + \frac{\mu}{Sc} \sum_s h_s \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\bar{\rho}_s}{\bar{\rho}} \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

Sc kennzeichnet die Schmidtzahl, \tilde{H} die Totalenthalpie der Strömung mit

$$\tilde{H} = \tilde{E} + \frac{\bar{p}}{\bar{\rho}} \quad . \quad (3.13)$$

Die Schub- und Normalspannungen $\tilde{\tau}$ hängen von der räumlichen Änderung der Geschwindigkeitskomponenten, und gemäß des Stokeschen Ansatzes von der dynamischen Viskosität μ ab. Für die hier betrachteten Newtonschen Fluide ergeben sich die Komponenten des Cauchyschen Spannungstensors $\tilde{\mathbf{T}}$ wie folgt:

$$\tilde{\tau}_{ik} = 2\mu\tilde{S}_{ik} \quad . \quad (3.14)$$

\tilde{S}_{ik} bezeichnet die Komponenten des spurfreien Verzerrungstensors $\tilde{\mathbf{S}}$

$$\tilde{S}_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} \delta_{ik} \quad . \quad (3.15)$$

Ausgehend von der Wirbelviskositätshypothese, der Analogie zwischen molekularen und turbulenten Transportprozessen, führt der Ansatz von Boussinesq für den Reynoldsschen Spannungstensor $\tilde{\mathbf{R}}$ mit

$$\tilde{\mathbf{R}} = \overline{\rho \mathbf{u}'' \mathbf{u}''} \quad (3.16)$$

auf

$$\tilde{R}_{ik} = -2\mu_t \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} \delta_{ik} \right] + \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \delta_{ik} \quad . \quad (3.17)$$

Die Proportionalitätskonstante μ_t wird als turbulente Viskosität interpretiert, die im Gegensatz zur laminaren Viskosität μ keine Stoffgröße, sondern eine strömungsmechanische Feldgröße beschreibt. Der im Vergleich zu Gleichung (3.14) zusätzlich auftretende Term repräsentiert einen turbulenten Druck

$$\bar{p}_t = \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \quad . \quad (3.18)$$

\tilde{k} bezeichnet die turbulente kinetische Energie, einen zusätzliche Anteil an kinetischer Energie aufgrund der turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} \sum_k \frac{\overline{\rho u_k'' u_k''}}{\bar{\rho}} \quad . \quad (3.19)$$

Diese ergibt zusammen mit der Gesamtenergie (3.8) die effektive turbulente Gesamtenergie

$$\tilde{E}_{\text{eff}} = \tilde{e} + \frac{1}{2} |\tilde{\mathbf{u}}|^2 + \tilde{k} \quad . \quad (3.20)$$

Der turbulente Druck kann mit dem mittleren Druck \bar{p} zu einem effektiven Druck \bar{p}_{eff} zusammengefaßt werden

$$\bar{p}_{\text{eff}} = \bar{p} + \bar{p}_t \quad . \quad (3.21)$$

Damit ergibt sich die effektive Totalenthalpie \tilde{H}_{eff}

$$\tilde{H}_{\text{eff}} = \tilde{E}_{\text{eff}} + \frac{\bar{p}_{\text{eff}}}{\bar{\rho}} \quad . \quad (3.22)$$

Analog zum Druck ergeben laminare und Wirbelviskosität eine effektive Viskosität

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t \quad . \quad (3.23)$$

Außer für die Reynoldsspannungen benötigt man eine weitere Schließungsannahme für die turbulenten Flüsse in der Energiegleichung, die aufgrund der Schwankung der Totalenthalpie und der Geschwindigkeit hervorgehen. Man kann diesen Term wie folgt schreiben:

$$\overline{\rho H'' u_k''} = \overline{\rho h'' u_k''} + \sum_i (\overline{\rho u_k'' u_i''}) \tilde{u}_i + \frac{1}{2} \sum_i \overline{\rho u_k'' u_i'' u_i''} \quad . \quad (3.24)$$

Der erste Term beschreibt eine turbulente Wärmestromdichte, die durch einen Ansatz der Form

$$\overline{\rho h'' u_k''} = \kappa_t \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_k} \quad (3.25)$$

modelliert wird. Die turbulente Wärmeleitfähigkeit κ_t ergibt sich mit Hilfe der turbulente Prandtlzahl Pr_t aus der Wirbelviskosität

$$\kappa_t = c_p \frac{\mu_t}{Pr_t} \quad . \quad (3.26)$$

Laminare und turbulente Wärmeleitfähigkeit können wiederum zu einer effektiven Größe zusammengefaßt werden

$$\kappa_{\text{eff}} = \kappa + \kappa_t \quad . \quad (3.27)$$

Die letzte Term in Gleichung (3.24) beschreibt den Transport kinetischer Turbulenzenergie. Er wird mit dem Term aus Gleichung (3.12), der die Diffusion der Turbulenzenergie beschreibt, zusammengefaßt und nach Wilcox [58] wie folgt approximiert:

$$\sum_i \overline{u_i'' \tau_{ik}} - \frac{1}{2} \sum_k \overline{\rho u_i'' u_k'' u_k''} = \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_k} \quad . \quad (3.28)$$

Für ideale Gase ergibt sich der Druck \bar{p} aus der Zustandsgleichung

$$\bar{p} = (\gamma - 1) \bar{\rho} \tilde{e} \quad , \quad (3.29)$$

die Viskosität wird mit Hilfe des Sutherlandgesetzes bestimmt

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{\tilde{T}}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{T_0 + S}{\tilde{T} + S} \right) \quad . \quad (3.30)$$

Die Wärmeleitfähigkeit κ ergibt sich mit Hilfe der Prandtlzahl Pr aus der Viskosität

$$\kappa = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{\mu}{Pr} \quad . \quad (3.31)$$

Für Gase im thermochemischen Gleichgewicht wurde die Berechnung dieser Größen als Funktion zweier Zustandsvariablen in Kapitel 2 abgeleitet.

Mit den gemachten Annahmen für die Reynoldsspannungen und die turbulenten Flüsse lassen sich die Flußvektoren (3.11) und (3.12) wie folgt umschreiben

$$\tilde{\mathbf{F}}_k^{konv} = \begin{pmatrix} \bar{\rho}_s \tilde{u}_k \\ \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_k + \bar{p}_{\text{eff}} \delta_{ik} \\ \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{H}_{\text{eff}} \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

$$\tilde{\mathbf{F}}_k^{diss} = - \begin{pmatrix} \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\bar{\rho}_s}{\bar{\rho}} \\ \tilde{\tau}_{ik}^* \\ \sum_i \tilde{u}_i \tilde{\tau}_{ik}^* + \kappa_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_k} - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_k} + \frac{\mu}{Sc} \sum_s h_s \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\bar{\rho}_s}{\bar{\rho}} \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

Zur Bestimmung der Schub- und Normalspannungen ist in Gleichung (3.14) der Effektivwert der Viskosität zu benutzen. Mit dem Verzerrungstensor (3.15) ergibt sich der Spannungstensor wie folgt:

$$\tilde{\mathbf{T}}^* = 2 \mu_{\text{eff}} \tilde{\mathbf{S}} + \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \mathbf{D} \quad (3.34)$$

Setzt man in den Gleichungen (3.32) und (3.33) die turbulenten Größen zu Null, erhält man die Flußdichtevektoren für laminare Strömungen. Diese Gleichungen zusammen mit Gleichung (3.5) und (3.10) stellen also eine allgemeine Schreibweise der Navier-Stokes Gleichungen dar.

3.2 Turbulenzmodellierung

Die Modellierung der turbulente Viskosität folgt dem Ansatz von Spalart und Allmaras [48] in der Version von Edwards und Chandra [12]. Das Modell gehört zur Klasse der Wirbelviskositätsmodelle. Das 1-Gleichungsmodell bietet gegenüber anderen Modellen einen guten Kompromiß zwischen Rechengeschwindigkeit, Genauigkeit und Stabilität. Bei der Formulierung der Transportgleichung für die Wirbelviskosität wird von einer veränderlichen Dichte ausgegangen. Der Anteil des Reynoldsschen Spannungstensors, der die turbulente kinetische Energie enthält, bleibt unberücksichtigt. Die turbulente dynamische Viskosität wird mit Hilfe einer modifizierten kinematischen Viskosität ν^* und einer Funktion f_{v1} , die lineares Verhalten von ν^* im wandnahen Bereich garantiert, modelliert

$$\mu_t = \bar{\rho} \nu_t = \bar{\rho} \nu^* f_{v1} \quad (3.35)$$

$$f_{v1} = \frac{\lambda^3}{\lambda^3 + c_{v1}^3} \quad \text{mit} \quad \lambda = \frac{\nu^*}{\nu_t} \quad (3.36)$$

Die Transportgleichung für die Wirbelviskosität lautet:

$$\frac{\partial \nu^*}{\partial t} + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \nu^* = c_{b1} S^* \nu^* - c_{w1} f_w \left(\frac{\nu^*}{d} \right)^2 + \frac{1}{\sigma} \{ \nabla [(\nu + \nu^*) \nabla \nu^*] + c_{b2} (\nabla \nu^*)^2 \} \quad (3.37)$$

Phänomenologisch betrachtet stellen der erste und zweite Term auf der rechten Seite der Transportgleichung Produktion und Destruktion der kinematischen Wirbelviskosität da,

während der dritte Term deren Diffusion beschreibt. Die Produktion von Wirbelviskosität ist dabei proportional zur Norm des Verzerrungstensors \mathbf{S}

$$S^* = \|\mathbf{S}\| \left(\frac{1}{\lambda} + f_{v1} \right) \quad . \quad (3.38)$$

f_w beschreibt eine Dämpfungsfunktion in Wandnähe

$$f_w = g \left(\frac{1 + c_{w3}^6}{g^6 + c_{w3}^6} \right)^{\frac{1}{6}} \quad (3.39)$$

mit

$$g = r + c_{w2} (r^6 - r) \quad (3.40)$$

und der Hilfsfunktion

$$r = \frac{\tanh \left(\frac{\nu^*}{S^* \kappa^2 d^2} \right)}{\tanh(1)} \quad . \quad (3.41)$$

Der wesentliche Unterschied dieser Formulierung im Gegensatz zum Originalmodell besteht in der Bestimmung der Proportionalitätskonstante S^* und des Verhaltens in Wandnähe. In der Originalformulierung von Spalart und Allmaras ergeben sich

$$S^* = \|\mathbf{S}\| + \frac{\nu^*}{\kappa^2 d^2} f_{v2} \quad (3.42)$$

und

$$r = \frac{\nu^*}{S^* \kappa^2 d^2} \quad . \quad (3.43)$$

Die verwendeten Konstanten sind in beiden Versionen gleich

$$\begin{aligned} \kappa &= 0,41 \\ c_{b1} &= 0,1355 \\ c_{b2} &= 0,622 \\ \sigma &= \frac{2}{3} \\ c_{w1} &= \frac{c_{b1}}{\kappa^2} + \frac{c_{b2}}{\sigma} + 1 \\ c_{w2} &= 0,3 \\ c_{w3} &= 2,0 \\ c_{v1} &= 7,1 \quad . \end{aligned} \quad (3.44)$$

Neben dem hier vorgestellten Turbulenzmodell sind im TAU Code eine ganze Reihe weiterer 1- und 2-Gleichungsmodelle sowie Reynoldsspannungsmodelle und Modelle für LES (*Large Eddy Simulation*) und DES (*Detached Eddy Simulation*) implementiert, die jedoch in der vorliegenden Arbeit keine Verwendung finden.

3.3 Räumliche und zeitliche Diskretisierung

Unter der Voraussetzung zeitlich und räumlich konstanter Kontrollvolumina ergibt sich aus Gleichung (3.5), unter Verzicht auf die Kennzeichnung der Mittelwerte, die zeitliche Änderung der Strömungsgrößen eines Kontrollvolumens aus dem auf sein Volumen V bezogenen Fluß Q über dessen Berandung Ω

$$\frac{dw}{dt} = -\frac{Q}{V} \quad (3.45)$$

mit

$$Q = \iint_{\Omega} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, d\Omega \quad . \quad (3.46)$$

3.3.1 Räumliche Diskretisierung

Die Strömungsvariablen werden auf den Knoten des primären Netzes gespeichert. Das duale Netz, welches die Zellschwerpunkte mit den Mittelpunkten der Primärnetzkannten verbindet, bildet die Kontrollvolumina. Abbildung 3.3.1 zeigt beispielhaft das primäre und das duale Rechnernetz. Besteht das Kontrollvolumen aus N Facetten ergibt sich der Fluß als Summe der normalen Flüsse über die einzelnen Facetten

$$Q = \sum_{i=0}^N Q_i \quad . \quad (3.47)$$

3.3.2 Diskretisierung der konvektiven Flüsse

Zur Berechnung der konvektiven Flüsse über eine Facette des Kontrollvolumens mit Normalenvektor \mathbf{n} wird ein Riemannproblem approximativ gelöst. Der normale Fluß ergibt sich aus den Strömungsgrößen beiderseits der Fläche, wobei der Index l Variablen links, der Index r Variablen rechts der Zellgrenze bezeichnet.

$$Q_i = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_{i,l} + \mathbf{F}_{i,r}) \cdot \mathbf{n}_i - \frac{1}{2} |\mathbf{A}| (w_{i,r} - w_{i,l}) \quad (3.48)$$

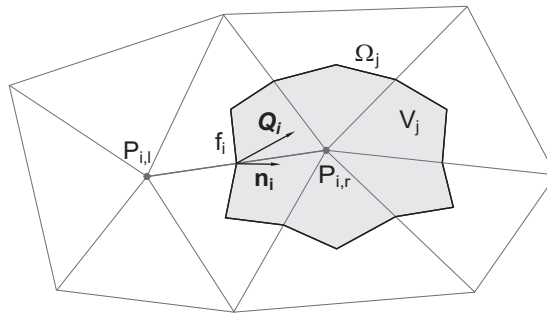


Abbildung 3.1: Prinzipielle Darstellung des primären und dualen Rechnernetzes.

$|\mathbf{A}|$ ist die Determinante der Jacobimatrix.

Im TAU Code sind für die *Upwind* Diskretisierung verschiedene approximative Riemannlöser verfügbar. Neben den Verfahren von Van Leer [25] und Roe [44] stehen das EFM (*Equilibrium Flux Method*) [37], MAPS+ (*Mach number based Advection Pressure Splitting*) [45] und verschiedene AUSM (*Advective Upstream Splitting Method*) Schemata [26] zu Verfügung. In der vorliegenden Arbeit findet ausschließlich der von Wada und Liou [56] entwickelte AUSMDV Löser Anwendung. Der Vektor der Strömungsgeschwindigkeit wird dabei in einen normalen und einen parallelen Anteil zur jeweilig betrachteten Facette aufgespalten

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^\perp + \mathbf{u}^\parallel \quad . \quad (3.49)$$

Der normale Anteil ergibt sich mit Hilfe des Einheitsnormalenvektors \mathbf{e}_n der betrachteten Facette

$$\mathbf{u}^\perp = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_n) \mathbf{e}_n \quad . \quad (3.50)$$

Zur Vereinfachung der Schreibweise wird in Anlehnung an die Notation von Wada und Liou der Anteil $\mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_n$ nachstehend als u bezeichnet. Der konvektive Fluß pro Fläche A über jede Facette läßt sich dann schreiben als:

$$\frac{\mathbf{Q}_i}{A_i} = \begin{cases} \mathbf{p}_{\frac{1}{2}} + (\rho u)_{\frac{1}{2}} \Psi_l & (\rho u)_{\frac{1}{2}} \geq 0 \\ \mathbf{p}_{\frac{1}{2}} + (\rho u)_{\frac{1}{2}} \Psi_r & (\rho u)_{\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (3.51)$$

mit

$$\Psi = \begin{pmatrix} 1 \\ u_k^\parallel \\ H \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{p}_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ [(\rho u^2)_{\frac{1}{2}} + p_{\frac{1}{2}}] \mathbf{e}_{n,k} \\ 0 \end{pmatrix} \quad . \quad (3.52)$$

Der Index $\frac{1}{2}$ bezeichnet gemittelte Zustände auf der Zellgrenze. Ähnlich der Aufspaltung von Van Leer ergibt sich

$$(\rho u)_{\frac{1}{2}} = u_l^+ \rho_l + u_r^- \rho_r \quad \text{und} \quad p_{\frac{1}{2}} = p_l^+ + p_r^- \quad . \quad (3.53)$$

Die aufgespaltenen Drücke und Geschwindigkeiten sind mit einer gemeinsamen Schallgeschwindigkeit $a_{l,r} = \max(a_l, a_r)$ wie folgt definiert:

$$p_l^+ = \begin{cases} p_l & a_{l,r} \leq u_l \\ \frac{p_l}{4} \left(\frac{u_l}{a_{l,r}} + 1 \right)^2 \left(2 - \frac{u_l}{a_{l,r}} \right) & -a_{l,r} \leq u_l \leq a_{l,r} \\ 0 & u_l \leq -a_{l,r} \end{cases} \quad (3.54)$$

$$p_r^- = \begin{cases} 0 & a_{l,r} \leq u_r \\ \frac{p_r}{4} \left(\frac{u_r}{a_{l,r}} - 1 \right)^2 \left(2 + \frac{u_r}{a_{l,r}} \right) & -a_{l,r} \leq u_r \leq a_{l,r} \\ p_r & u_r \leq -a_{l,r} \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
u_l^+ &= \begin{cases} u_l & a_{l,r} \leq u_l \\ \alpha_l \left[\frac{(u_l + a_{l,r})^2}{4a_{l,r}} \right] + u_l & 0 \leq u_l \leq a_{l,r} \\ \alpha_l \frac{(u_l + a_{l,r})^2}{4a_{l,r}} & -a_{l,r} \leq u_r \leq 0 \\ 0 & u_r \leq -a_{l,r} \end{cases} \\
u_r^- &= \begin{cases} 0 & a_{l,r} \leq u_r \\ -\alpha_l \frac{(u_r - a_{l,r})^2}{4a_{l,r}} & 0 \leq u_r \leq a_{l,r} \\ -\alpha_r \left[\frac{(u_r - a_{l,r})^2}{4a_{l,r}} \right] + u_r & -a_{l,r} \leq u_r \leq 0 \\ u_r & u_r \leq -a_{l,r} \end{cases}
\end{aligned} \tag{3.55}$$

mit

$$\alpha_l = \frac{2 \left(\frac{p}{\rho} \right)_l}{\left(\frac{p}{\rho} \right)_l + \left(\frac{p}{\rho} \right)_r} \quad \text{und} \quad \alpha_r = \frac{2 \left(\frac{p}{\rho} \right)_r}{\left(\frac{p}{\rho} \right)_l + \left(\frac{p}{\rho} \right)_r} . \tag{3.56}$$

Das AUSMDV Schema ist eine Kombination, welche die Vorteile des AUSMD mit denen des AUSMV kombiniert. Während das erste zur Klasse der FDS (*Flux Difference Splitting*) Verfahren gehört, folgt das zweite dem FVS (*Flux Vector Splitting*) Ansatz. Die Verfahren unterscheiden sich in der Behandlung der Normalkomponente des Impulses. Während für den AUSMV

$$(\rho u^2)_{\frac{1}{2}}^{\text{AUSMV}} = u_l^+ (\rho u)_l + u_r^- (\rho u)_r \tag{3.57}$$

gilt, ergibt sich für den AUSMD

$$(\rho u^2)_{\frac{1}{2}}^{\text{AUSMD}} = \begin{cases} (\rho u)_{\frac{1}{2}} u_l & (\rho u)_{\frac{1}{2}} \geq 0 \\ (\rho u)_{\frac{1}{2}} u_r & (\rho u)_{\frac{1}{2}} \leq 0 \end{cases} . \tag{3.58}$$

Für den AUSMDV ergibt sich als Kombination

$$(\rho u^2)_{\frac{1}{2}}^{\text{AUSMDV}} = \left(\frac{1}{2} - s \right) (\rho u^2)_{\frac{1}{2}}^{\text{AUSMD}} + \left(\frac{1}{2} + s \right) (\rho u^2)_{\frac{1}{2}}^{\text{AUSMV}} \tag{3.59}$$

mit

$$s = \frac{1}{2} \min \left(1, 10 \frac{|p_r - p_l|}{\min(p_l, p_r)} \right) . \tag{3.60}$$

Das AUSMDV Schema produziert beim Schalldurchgang innerhalb eines Expansionsfächers einen unphysikalischen Sprung in den Stömungsgrößen. Um dies zu vermeiden, wird eine als *entropy fix* bezeichnete Sonderbehandlung eingeführt. Liegt eine Expansionswelle vor, ist also $(u - a)_l < 0$ und $(u - a)_r > 0$ oder $(u + a)_l < 0$ und $(u + a)_r > 0$, wird der Fluß \mathbf{Q} wie folgt korrigiert:

$$\mathbf{Q}^{\text{entropy fix}} = \mathbf{Q} - \frac{A}{8} \Delta \lambda (\rho_r \Psi_r - \rho_l \Psi_l) \tag{3.61}$$

mit

$$\Delta\lambda = (u - a)_r - (u - a)_l \quad \text{bzw.} \quad \Delta\lambda = (u + a)_r - (u + a)_l \quad . \quad (3.62)$$

Eine zweite Sonderbehandlung betrifft das sogenannte *carbuncle*-Phänomen [38], das eine Vielzahl unphysikalischer Lösungen hauptsächlich in Verbindung mit starken Verdichtungsstößen bezeichnet. Seine Ursache wird in den unphysikalischen Zwischenzuständen vermutet, mit denen jedes Verfahren den Stoß auflöst. Der Vorschlag von Quirk [38], in Stoßnähe einen dissipativeren und somit stabileren Riemannlöser zu verwenden wurde von Wada und Liou dahingehend modifiziert, dieses Vorgehen nur auf die Flußbilanzen der Zwischenzustände anzuwenden. Diese Behandlung des Stoßes wird in der Literatur auch als *shock fix* bezeichnet. Als dissipativeres Verfahren wurde die Aufspaltung der Flußvektoren von Hänel und Schwane [19] implementiert.

$$\mathbf{Q}^{\text{Hänel}} = \rho_l u_l^+ \Psi_l + \rho_r u_r^- \Psi_r + \mathbf{p}_{\frac{1}{2}} \quad (3.63)$$

mit

$$p^\pm = \begin{cases} \frac{p}{4} \left(\frac{u}{a} \pm 1 \right)^2 \left(2 \mp \frac{u}{a} \right) & |u| \leq a \\ p^{\frac{u \pm |u|}{2u}} & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.64)$$

$$u^\pm = \begin{cases} \pm \frac{1}{4a} (u \pm a)^2 & |u| \leq a \\ \frac{u \pm |u|}{2} & \text{sonst} \end{cases} \quad . \quad (3.65)$$

Upwind-Verfahren sind Verfahren mit erster Ordnung Genauigkeit, d.h. ihre Lösungen sind über das Kontrollvolumen konstante Strömungsgrößen. Zweite Ordnung Genauigkeit, also stückweise lineares Verhalten, kann mit Hilfe der Gradienten der primitiven Strömungsgrößen (ρ_s , ρ , u , v , w , p) konstruiert werden. Für die Strömungsgröße ϕ ergibt sich

$$\Phi_r = \Phi_r + \frac{1}{2} L \nabla \Phi_r (\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_r) \quad (3.66)$$

$$\Phi_l = \Phi_l + \frac{1}{2} L \nabla \Phi_l (\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_l) \quad . \quad (3.67)$$

Um Oszillationen des Gradienten an Diskontinuitäten zu vermeiden wird eine Limitierungsfunktion L eingeführt. Für die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Simulationen wurde vorwiegend die Limitierung von Barth und Jespersen [2] und der *minmod*-Limiter verwendet.

3.3.3 Diskretisierung der dissipativen Flüsse

Die für die Berechnung der dissipativen Flüsse benötigten Gradienten, ergeben sich aus den Mittelwerten der Gradienten der angrenzenden Zellen

$$(\nabla \Phi)_i = \frac{1}{2} [(\nabla \Phi)_l + (\nabla \Phi)_r] \quad . \quad (3.68)$$

3.3.4 Zeitintegration

Die zeitliche Änderung des Stömungszustandes \mathbf{w}_i in einem Volumen V_i um den Punkt P_i ergibt sich aus

$$\frac{d\mathbf{w}_i}{dt} + \mathbf{R}_i = 0 \quad . \quad (3.69)$$

Ein Vergleich mit Gleichung (3.45) ergibt für das Residuum \mathbf{R}_i

$$\mathbf{R}_i = \frac{\mathbf{Q}_i}{V_i} \quad . \quad (3.70)$$

Der TAU Code kann sowohl stationäre als auch instationäre Strömungen simulieren. Für die zeitgenaue Berechnung steht neben einem globalen auch ein duales Zeitschrittverfahren zur Verfügung. In beiden Fällen kann die Zeitintegration mittels eines von Jameson et al. [24] beschriebenen, expliziten Runge-Kutta Verfahrens mit konstanter Schrittweite erfolgen. Für ein k -Schritt Runge-Kutta Verfahren ergibt sich folgendes Schema:

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_i^{(0)} &= \mathbf{w}^n \\ \mathbf{w}_i^{(1)} &= \mathbf{w}_i^{(0)} - \alpha_1 \Delta t_i \mathbf{R}_i^{(0)} V_i \\ &\vdots \\ \mathbf{w}_i^{(k)} &= \mathbf{w}_i^{(0)} - \alpha_k \Delta t_i \mathbf{R}_i^{(k)} V_i \\ \mathbf{w}_i^{n+1} &= \mathbf{w}_i^{(k)} \quad . \end{aligned} \quad (3.71)$$

\mathbf{w}_i^n beschreibt die Lösung im Kontrollvolumen V_i zur Zeit t^n .

Bei der Verwendung eines globalen Zeitschritts ist das Verfahren nur mit zwei Schritten und den Koeffizienten

$$\alpha_1 = 0,5 \quad \text{und} \quad \alpha_2 = 1,0 \quad (3.72)$$

zeitgenau. Der globale Zeitschritt Δt ergibt sich als Minimum der Zeitschritte aller Kontrollvolumina

$$\Delta t = \min_{V_i} \Delta t_i \quad . \quad (3.73)$$

Beim dualen Zeitschrittverfahren wird das Zeitintervall $[0, t]$ in N Subintervalle der Form $0 < t^1 < \dots < t^{N-1} < t$ unterteilt. Eine Rückwärtsdifferenz zweiter Ordnung für die Zeitableitung (3.69) ergibt ein nichtlineares System quasi-stationärer Zustände

$$\frac{3}{2\Delta t} \mathbf{w}_i^{n+1} - \frac{2}{\Delta t} \mathbf{w}_i^n + \frac{1}{2\Delta t} \mathbf{w}_i^{n-1} = -\mathbf{R}_i^{n+1} \quad . \quad (3.74)$$

Sind alle Zustände bis zum Zeitpunkt t^n bekannt, ergibt sich der Zustand zum Zeitpunkt $n+1$ als stationäre Lösung der Gleichung

$$\frac{d\mathbf{w}_i^{n+1}}{dt^{\text{dual}}} + \mathbf{R}_i^{\text{dual}} = 0 \quad . \quad (3.75)$$

Mit der fiktiven dualen Zeit t^{dual} und dem modifizierten Residuum

$$\mathbf{R}_i^{\text{dual}} = \mathbf{R}_i^{n+1} + \frac{3}{2\Delta t} \mathbf{w}_i^{n+1} - \frac{2}{\Delta t} \mathbf{w}_i^n + \frac{1}{2\Delta t} \mathbf{w}_i^{n-1} \quad . \quad (3.76)$$

Das Problem kann mittels eines 3-Schritt Runge-Kutta Verfahrens und den Koeffizienten

$$\alpha_1 = 0,15 \quad , \quad \alpha_2 = 0,5 \quad , \quad \alpha_3 = 1,0 \quad (3.77)$$

gelöst werden.

Alternativ steht zur Lösung des Gleichungssystems (3.75) ein von Dwight [11] implementiertes implizites Verfahren zur Verfügung, indem ein vereinfachtes, linearisiertes Gleichungssystem mit Hilfe eines symmetrischen Gauß-Seidel (SGS) Verfahrens gelöst wird.

Für die Simulation stationärer Strömungen folgt aus der Bedingung $\frac{d\mathbf{w}}{dt} = 0$

$$\mathbf{R}_i = 0 \quad . \quad (3.78)$$

Durch Einführen einer fiktiven Zeit kann eines der oben genannten Integrationsverfahren angewendet werden. Beim lokalen Zeitschrittverfahren wird der fiktive Zeitschritt so gewählt, daß er für jedes Kontrollvolumen das mögliche Maximum annimmt. Dieses Vorgehen beschleunigt die Konvergenz zum stationären Zustand ist aber nicht zeitgenau. Diese Beschleunigungstechnik wird auch bei der Berechnung der quasi-stationären Zustände des dualen Zeitschrittverfahrens angewendet.

3.4 Randbedingungen

Die Ränder des Rechengebiets werden gesondert behandelt. Je nach Art der Begrenzung müssen bestimmte Bedingungen, sogenannte Randbedingungen, erfüllt sein. Für die in der vorliegenden Arbeit dargestellten numerischen Simulationen wurden folgende Randbedingungen verwendet.

3.4.1 Reibungsfreie Wandrandbedingungen

Für feste Wände werden zwei Arten von Randbedingungen unterschieden, die reibungsfreie und die reibungsbehaftete Wand. Beide Typen werden nicht durchströmt, d. h. die Normalkomponente der Geschwindigkeit muß verschwinden

$$\sum_k u_k n_k = 0 \quad . \quad (3.79)$$

n_k beschreibt die Komponenten des Normalenvektors der betrachteten Wandzelle. Für die reibungsfreie Wand verschwinden außerdem die viskosen Flüsse

$$\mathbf{F}_k^{\text{diss}} = 0 \quad . \quad (3.80)$$

Als Fluß über die Wandfacette bleibt nur der durch den Druck hervorgerufene Impulsfluß

$$\mathbf{F}|_{\text{Rand}} = \begin{pmatrix} 0 \\ pn_k \\ 0 \end{pmatrix} \quad . \quad (3.81)$$

3.4.2 Reibungsbehaftete Wandrandbedingungen

Für die reibungsbehaftete Wände gilt zusätzlich, daß neben der Normalkomponente aufgrund der Haftbedingung auch die Tangentialkomponenten der Geschwindigkeit verschwinden

$$\mathbf{u}|_{\text{Rand}} = 0 \quad . \quad (3.82)$$

Zusätzlich wird für die isothermer Wandrandbedingung die Wandtemperatur T_w gesetzt

$$T|_{\text{Rand}} = T_w \quad , \quad (3.83)$$

bei adiabater Randbehandlung wird der Energiefluß über die Randfacette gesetzt

$$\left[\left(\kappa \nabla T + \frac{\mu}{Sc} \sum_s h_s \nabla \frac{\rho_s}{\rho} \right) \cdot \mathbf{n} \right] \Big|_{\text{Rand}} = 0 \quad . \quad (3.84)$$

Während es sich bei der Randbehandlung für die reibungsfreie Wand um eine reine Flußrandbedingung handelt, ist die Randbedingung für reibungsbehaftete Wände eine Kombination aus Fluß- und Setzrandbedingung.

3.4.3 Ein- und Auströmrandbedingung

Die in dieser Arbeit simulierten Konfigurationen enthalten ausschließlich supersonische Ein- bzw. Ausströmränder. Da sich bei Überschallgeschwindigkeit keine Information entgegen der Strömungsrichtung ausbreiten kann, werden die Werte auf dem Einströmrand gesetzt. Bezeichnet \mathbf{w}_∞ die Strömungsgrößen der Anströmung ergibt sich für die Randfacetten am Einströmrand

$$\mathbf{w}|_{\text{Rand}} = \mathbf{w}_\infty \quad . \quad (3.85)$$

Für den Überschallausströmrand werden die Werte auf die Randfacetten extrapoliert

$$\mathbf{w}|_{\text{Rand}} = \mathbf{w} \quad . \quad (3.86)$$

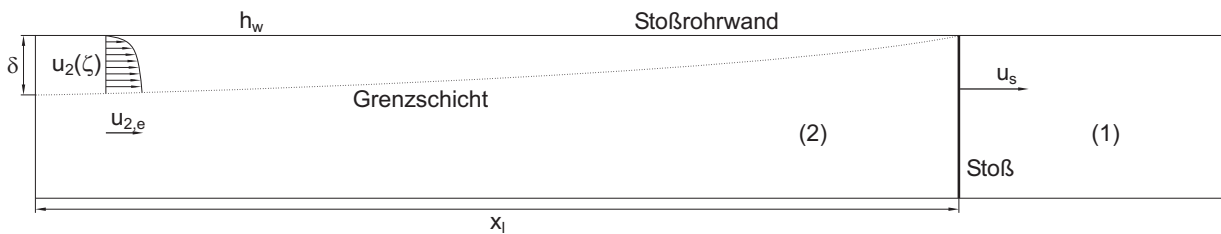


Abbildung 3.2: Grenzschicht hinter einem sich mit konstanter Geschwindigkeit in ruhendes Gas ausbreitenden Verdichtungsstoß.

3.4.4 Einströmrandbedingung für Stoßrohrströmung

Für die, in Kapitel 5 diskutierten Ergebnisse der Simulation der Stoßrohrströmung im Hochenthalpiekanal Göttingen wurde eine spezielle Randbedingung implementiert. In einem Stoßwellenrohr breiten sich nach dem Bersten der Membran Kompressions- und Expansionswellen aus, die im Gas eine Geschwindigkeit induzieren. An einem festen Wandpunkt wächst die Grenzschicht nach passieren dieser Wellen mit der Zeit bzw. mit dem Abstand zur Welle an. Mit dem Bersten der Membran wird auch die Mediengrenze zwischen Treib- und Testgas in Bewegung gesetzt. Das Treibgas läuft über die Grenzschicht des Testgases. Unterschiedliche Gaseigenschaften sowie Zustandsgrößen beider Gase beeinflussen dabei das Grenzschichtprofil. Um also den gesamten Vorgang geschlossen zu simulieren, wäre es notwendig, den Prozess des Membranberstens und somit das komplette Stoß- und Kompressionsrohr zu simulieren. Dies ist in Anbetracht des enormen Rechenaufwandes nicht möglich. Im dargestellten Fall wurde nur ein Teil des HEG Stoßrohres im Bereich der Endwand simuliert. Dazu wurde eine Randbedingung formuliert, die das Anwachsen der Grenzschicht am Einströmrand berücksichtigt. Bei der Randbedingung handelt es sich um eine Setzrandbedingung analog zu Gleichung (3.85), bei der die konservativen Variablen auf dem überwiegend supersonischen Einströmrand gesetzt werden.

Die Beschreibung der Grenzschicht beruht auf den Arbeiten von Mirels. Mirels [34] beschreibt das turbulente Geschwindigkeitsprofil hinter einer sich mit konstanter Geschwindigkeit ausbreitenden Stoßwelle. Abbildung 3.4.4 zeigt schematisch das Stömungsfeld. u_s bezeichnet die Stoßgeschwindigkeit, der Index e Größen am Rand der Grenzschicht. Strömungsgrößen nach Kompression durch die Stoßwelle werden mit Index 2, Stömungsgrößen des ruhenden Gases stromaup des Verdichtungsstoßes mit Index 1 bezeichnet. Nach Mirels ergibt sich die Grenzschichtdicke δ als

$$\delta = 0,037 \left\{ \frac{(u^* - 1)^3}{[u^* + (\frac{7}{3})]^4} \right\}^{\frac{1}{5}} \frac{x'_l}{(p'_1 x'_l)^{\frac{1}{5}}} \quad (3.87)$$

mit

$$u^* = \frac{u_s}{u_s - u_{2,e}} \quad . \quad (3.88)$$

Die Größen am Grenzschichtrand ergeben sich aus der Rankine-Hugoniot Gleichung für senkrechte Verdichtungsstöße. Die Umrechnung auf SI-Einheiten erfolgt gemäß:

$$p' [\text{atm}] = \frac{p [\text{Pa}]}{101325} \quad \text{und} \quad x'_l [\text{ft}] = 3,28084 x_l [\text{m}] \quad . \quad (3.89)$$

Die Grenzschichtdicke δ ist bei konstanten Strömungsbedingungen nur von der Entfernung x_l zum Stoß und über

$$x_l = u_s t \quad (3.90)$$

von der Zeit t abhängig. Mit

$$\zeta = \frac{d}{\delta} \quad (3.91)$$

ergibt sich das turbulente Geschwindigkeitsprofil für die x-Komponente der Geschwindigkeit als Funktion des Wandabstandes d und der Grenzschichtdicke

$$u_2(\zeta) = \begin{cases} u_{2,e} \zeta^{\frac{1}{7}} & \zeta < 1 \\ u_{2,e} & \text{sonst} \end{cases} . \quad (3.92)$$

y- und z-Komponente werden vernachlässigt

$$v_2(\zeta) = w_2(\zeta) = 0 \quad . \quad (3.93)$$

Für das Dichteprofil ergibt sich

$$\rho_2(\zeta) = \begin{cases} \rho_{2,e} \frac{h_{2,e}}{h_w} \left(1 + b \zeta^{\frac{1}{7}} + c \zeta^{\frac{2}{7}}\right)^{-1} & \zeta < 1 \\ \rho_{2,e} & \text{sonst} \end{cases} , \quad (3.94)$$

h_w bezeichnet die Wandenthalpie, die als konstant angenommen wird. Bei konstanter Wandtemperatur T_w gilt

$$h_w = h_1 \quad . \quad (3.95)$$

Mit der *Recovery*-Enthalpie

$$h_r = h_{2,e} + \frac{r}{2} (u^* - 1)^2 \quad (3.96)$$

und einem *Recovery*-Faktor von $r = 0,9$ ergeben sich die Koeffizienten wie folgt:

$$b = \frac{h_r}{h_w} - 1 \quad \text{und} \quad c = \frac{h_r - h_{2,e}}{h_w} \quad . \quad (3.97)$$

Die Energie ergibt sich gemäß Gleichung (3.8)

$$E_2(\zeta) = e_2(\rho_2, p_2) + \frac{1}{2} (u_2(\zeta))^2 \quad . \quad (3.98)$$

Die innere Energie e_2 stromab der Stoßwelle ist eine Funktion des Drucks p_2 und der Dichte $\rho_2(\zeta)$, die wiederum eine Funktion der Grenzschichtdicke ist. Ihre Berechnung erfolgt mit Hilfe des in Kapitel 2 vorgestellten Verfahrens. Für die Randbedingung ergibt sich somit der Vektor der konservativen Variablen wie folgt:

$$\mathbf{w}|_{\text{Rand}} = \mathbf{w}_2 \quad . \quad (3.99)$$

Der Stoßwelle folgt in einem gewissen Abstand t_k die Trennfläche zwischen Treib- und Testgas. Druck und Geschwindigkeit werden über diese Kontaktfläche als konstant angenommen. Für das Geschwindigkeitsprofil gilt weiterhin der Zusammenhang (3.92). Die Berechnung der Dichte- und Energieprofile erfolgt dann mit den Zustandgrößen des Treibgases. Wird der Zustand des Treibgases mit dem Index 3 bezeichnet folgt für die Randbedingung

$$\mathbf{w}|_{\text{Rand}} = \begin{cases} \mathbf{w}_2 & t < t_k \\ \mathbf{w}_3 & t \geq t_k \end{cases} \quad . \quad (3.100)$$

Auf die Bestimmung des Treibgaszustandes und den Zeitpunkt des Erreichen des Einströmrandes wird in Kapitel 5 näher eingegangen.

3.4.5 Symmetrierandbedingung

Für die Behandlung der Symmetrieränder des Rechengebietes wird der Zustand der Zelle vor dem Rand in eine fiktive Zelle gleicher Geometrie auf der entgegengesetzten Seite des Randes gespiegelt. Eine Flußberechnung in Symmetrierichtung bzw. in Umfangsrichtung bei achsensymmetrischen Rechnungen ist nicht nötig. Eine detaillierter Beschreibung der Behandlung achsensymmetrischer Ränder findet sich bei Reimann et al. [43].

3.5 Netzadaption

Das vorgestellte numerische Verfahren kann Strömungsfelder auf strukturierten, unstrukturierten und hybriden Netzen simulieren. Als strukturiert werden hier solche Netze bezeichnet, die aus prismatischen Zellen aufgebaut sind. Die Grundfläche kann sowohl vier- als auch dreieckig sein. Unstrukturierte Netze sind im wesentlichen aus Tetraedern aufgebaut. Die Kombination beider führt zu hybriden Netzen die, bei Verwendung viereckiger Prismen, zusätzlich Pyramiden als Übergangselemente zwischen beiden Typen beinhalten können. Der Vorteil in der Kombination beider Netztypen liegt in der einfachen Vernetzung komplexer Geometrien mittels Tetraedern, bzw. in der guten Auflösung wandnaher viskoser Schichten mit prismatischen Zellen. In der vorliegenden Arbeit wurden ausschließlich zweidimensionale bzw. axialsymmetrische Fälle studiert. Dabei reicht es aus, unter Ausnutzung der Symmetrie und einer entsprechenden Randbedingung, eine Ebene des Feldes zu Vernetzen. Die Vorteile beider Netztypen und ihrer Kombination bleiben uneingeschränkt erhalten. Lediglich die Elemente des primären Rechnernetzes ändern sich. In zwei Dimensionen ergeben sich Drei- und Vierecke statt Tetra- und Hexaedern. Die folgenden Ausführungen beschränken sich auf zweidimensionale Rechnernetze.

Zur besseren Auflösung strömungsmechanischer Phänomene erlaubt das Netzadaptionsmodul eine lokale Verfeinerung des primären Rechnernetzes. Dabei werden im Ausgangsnetz durch Kantenteilung neue Punkte gebildet. Für die Auswahl der zu verfeinernden Kanten stehen ein differenzen- und ein gradientenbasierter Indikator zur Auswahl. Als Indikator kann jede beliebige Variable des Strömungsfeldes gewählt werden. Abbildung 3.5 zeigt die Verfeinerung dreieckiger Elemente. Dreiecke mit einer markierten Kante werden in zwei Dreiecke geteilt, ist mehr als eine Kante markiert, erfolgt die Teilung in vier Dreiecke.

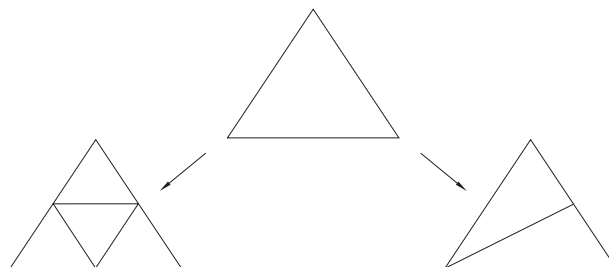


Abbildung 3.3: Verfeinerung eines dreieckigen Elements mit einer (rechts) und mehr als einer markierten Kante (links).

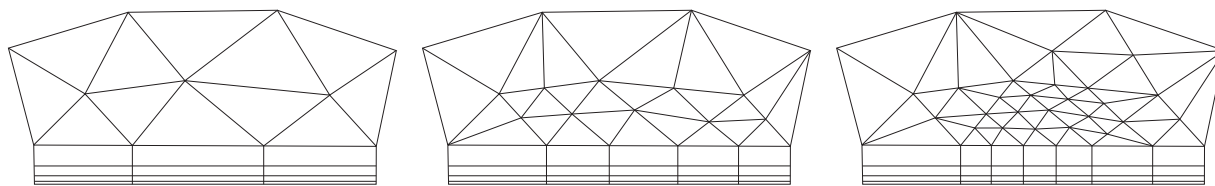


Abbildung 3.4: Beispielhafte Verfeinerung eines hybriden Rechnernetzes. Links ist das Ausgangsnetz, in der Mitte und rechts das Netz nach der ersten und zweiten Adaption.

Für Vierecke ist nur die Teilung der Kanten senkrecht zur Schichtrichtung erlaubt, eine Verfeinerung der parallelen Kanten ist nicht möglich, d. h. die Anzahl der Schichten im strukturierten Teil des Netzes bleibt unverändert. Die Adaption erfolgt ebenfalls durch Halbierung der Seitenkanten der Elemente. Punkte, die nicht gleichzeitig Eckpunkte aller angrenzenden Elemente sind, werden als hängende Knoten bezeichnet und sind nicht erlaubt. Das hat zur Folge, daß die Markierung einer an der Grenze zur strukturierten Schicht liegenden Kante die Teilung des gesamten Stapels nach sich zieht. Im Gegensatz zu den Punkten des Ausgangsnetzes können durch Adaption hinzugefügte Punkte wieder entfernt werden. Die Netzzellen werden durch wiederholte Adaption solange geteilt bis eine vorgegebene minimale Kantenlänge oder die maximale Punktzahl im Netz erreicht ist. Nach der Adaption werden die strömungsmechanischen Feldgrößen auf das neue Rechnernetz interpoliert. Abbildung 3.4 zeigt beispielhaft die zweifache Netzverfeinerung eines hybriden Rechnernetzes.

3.6 Parallelisierung

Der komplette TAU Code ist parallelisiert [1]. Durch die Aufteilung des Rechengebietes in mehrere Teilgebiete können diese auf verschiedenen Rechenmaschinen oder Knoten eines Rechenclusters bearbeitet werden. Es kann entweder das duale oder das primäre Netz partitioniert werden. Die Primärnetzpartitionierung bietet den Vorzug, daß auch die Berechnung der dualen Netze sowie die Adaption parallel erfolgen kann. Die Kommunikation zwischen den einzelnen Teilnetzen erfolgt via MPI (*Message Passing Interface*). In der vorliegenden Arbeit wurde, dem damaligen Entwicklungsstand entsprechend, die Dualnetzpartitionierung mit sequentieller Adaption verwendet.

4 Validierung

Für die Validierung der implementierten Modellierung wird eine Reihe von stationären und instationären Simulationen durchgeführt. Dabei werden die Ergebnisse mit Lösungen anderer, bereits validierter Verfahren verglichen, oder sie werden experimentellen oder, falls möglich, analytischen Lösungen gegenübergestellt.

4.1 Gleichgewichtsmodellierung

Eine Validierung der implementierten Gleichgewichtsmodellierung erfolgt anhand eines Vergleiches von Ergebnissen, die mit einem etablierten numerischen Strömungslöser gewonnen wurden. Bei diesem Verfahren handelt es sich um den ebenfalls im Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt entwickelten CEVCATS-N Code. Eine detaillierte Beschreibung des Verfahrens findet sich bei Brück [5] und Radespiel et al. [40]. Die verwendete Gleichgewichtsmodellierung basiert auf den Arbeiten von Brenner et al. [4]. Für den Vergleich wurde jeweils die Umströmung eines Zylinders und einer Kugel mit einem Radius von $R = 45 \text{ mm}$ und einer Anströmmachzahl von $Ma_\infty = 12$ simuliert. Die Simulationen wurden

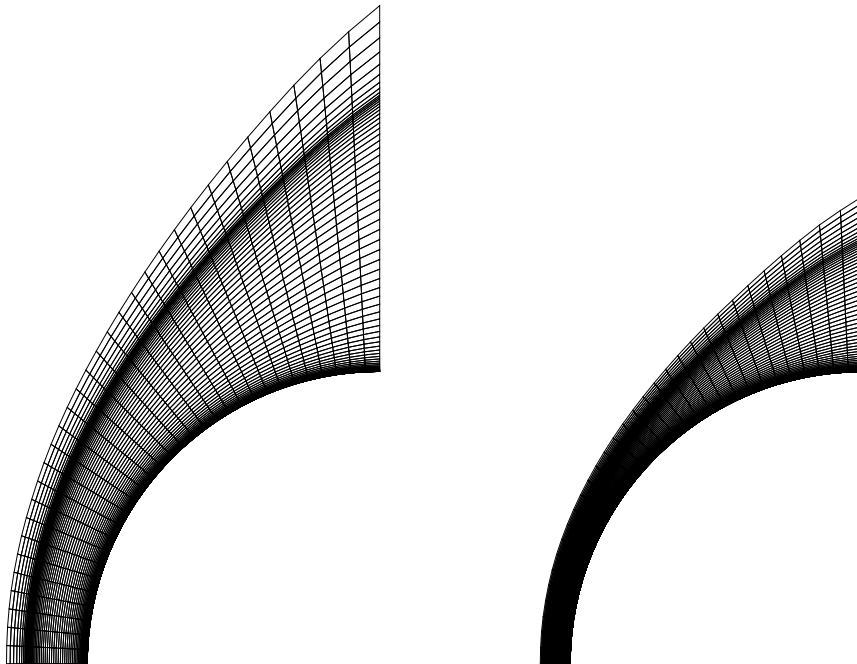
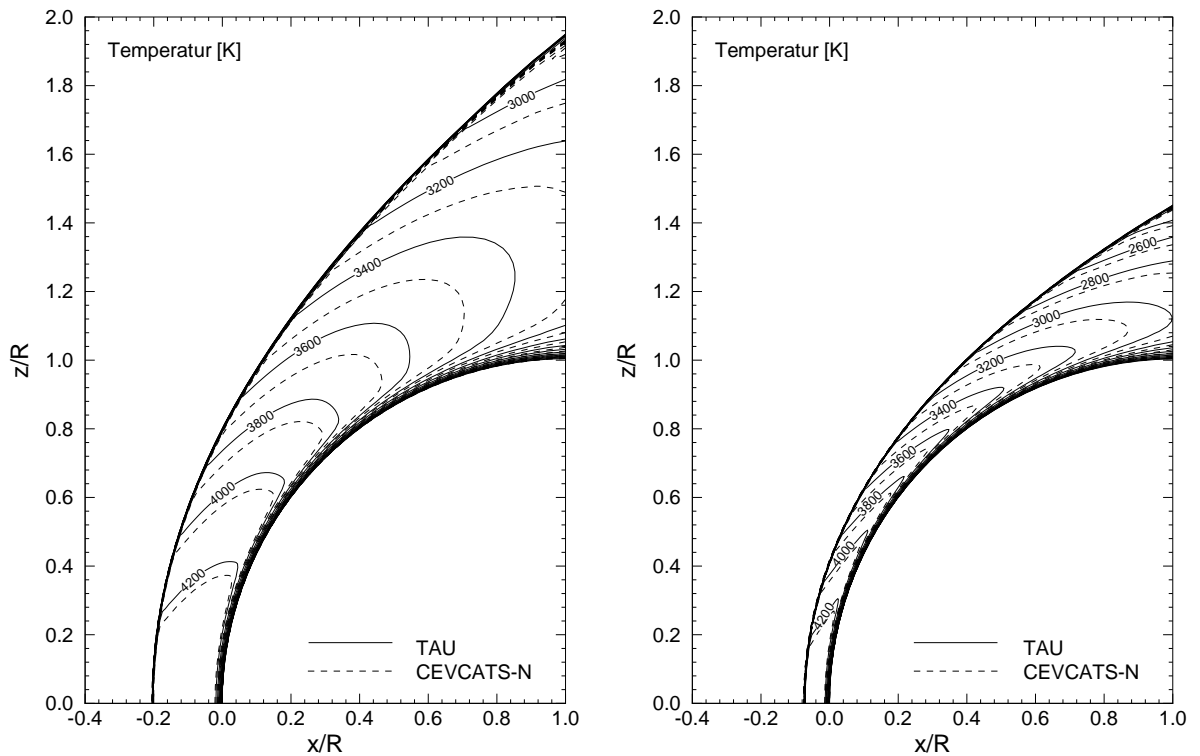


Abbildung 4.1: Rechennetze für Zylinder- (links) und Kugelumströmung (rechts).

Tabelle 4.1: Testfalldefinition für Zylinder- und Kugelumströmung.

Ma_∞	T_∞ [K]	ρ_∞ [kg/m ³]	y_{N_2}	y_{O_2}	R [mm]	T_w [K]
12	300	0,0017	0,76	0,24	45	300

2-dimensional bzw. achsensymmetrisch auf jeweils identischen Netzen durchgeführt. Abbildung 4.1 zeigt die strukturierten Netze. Beide Gitter haben eine Auflösung von 81×33 Punkten und sind im Bereich der Kopfwelle verfeinert. Tabelle 4.1 enthält die Anströmbedingungen. Die Strömung wird laminar, die Oberfläche isotherm modelliert. Abbildung 4.2 zeigt Isolinien der Temperatur von 4200 K in 200 K Schritten kleiner werdend. Die Differenz beider Lösungen ist auf die unterschiedliche physikalische Modellierung der Gaseigenschaften zurückzuführen. Diese Unterschiede müssen bei verschiedenen Gleichgewichtslösern in Kauf genommen werden, da sich abhängig von der Anzahl der betrachteten Freiheitsgrade der Gasteilchen Variationen in den Zustandsgrößen des Gemisches ergeben. Trotz dieser Unterschiede stimmen der Stoßabstand sowie die Form der Kopfwelle gut überein. Die Abbildungen 4.3 und 4.4 zeigen den Verlauf von Temperatur und Dichte entlang der Staustromlinie für die Zylinder- bzw. die Kugelrechnung. Für beide Werte wird im Bereich der Stoß- und Grenzschicht eine gute Übereinstimmung beobachtet. Für die Unterschiede

**Abbildung 4.2:** Berechnetes Strömungsfeld für Zylinder- (links) und Kugelumströmung (rechts). Dargestellt sind Isolinien der Temperatur.

bei der Auflösung der Kopfwelle sind die unterschiedlichen Riemannlöser beider Verfahren verantwortlich. Während in CEVCATS-N ein AUSM/Van Leer Schema implementiert ist, verwendet TAU als Standardverfahren AUSMDV.

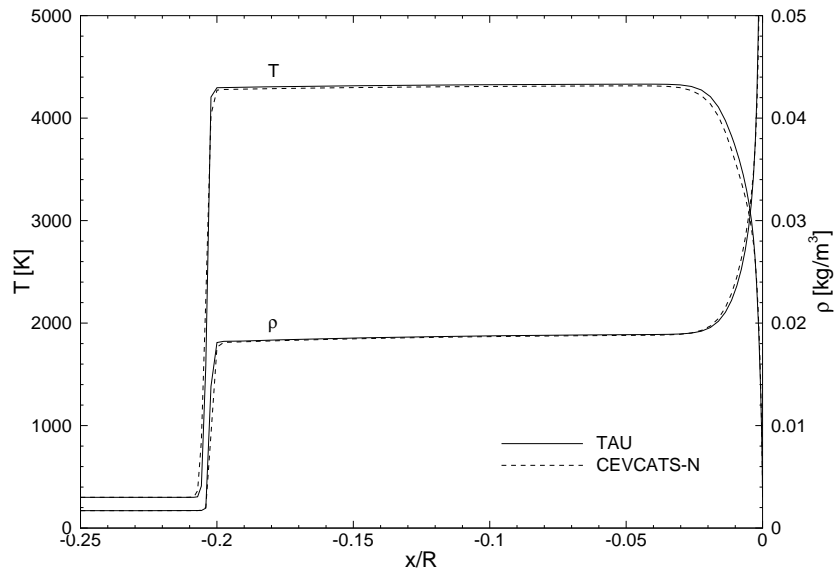


Abbildung 4.3: Berechnete Dichte- und Temperaturverläufe entlang der Staustromlinie vor dem Zylinder.

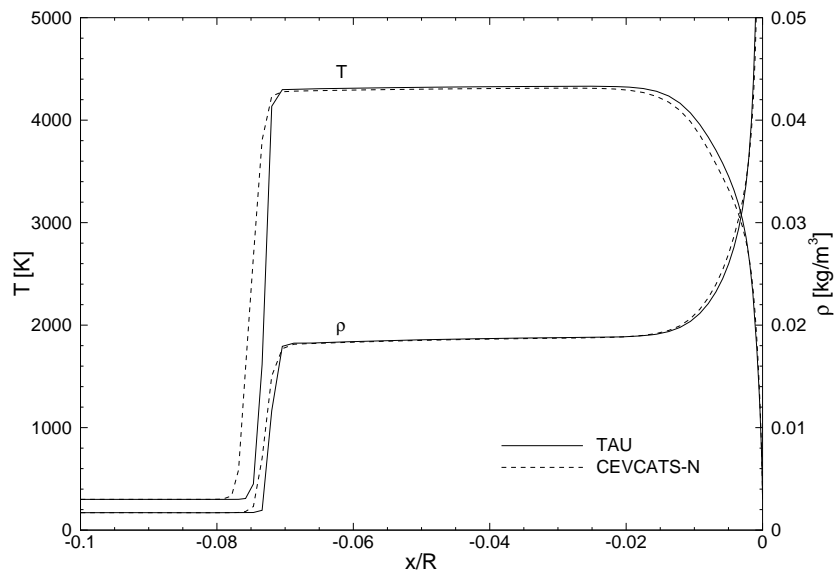


Abbildung 4.4: Berechnete Dichte- und Temperaturverläufe entlang der Staustromlinie vor der Kugel.

Tabelle 4.2: Testfalldefinition für die Simulation des idealen Stoßwellenrohres.

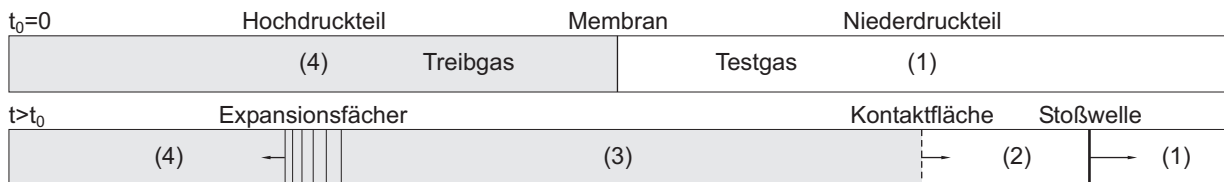
	γ	R/M [J/(kg K)]	T [K]	ρ [g/m ³]	u [m/s]
Hochdruckteil (Luft)	1,4	287	3000	10	0
Niederdruckteil (Luft)	1,4	287	300	1	0
Hochdruckteil (He)	1,67	2077	1000	10	0
Niederdruckteil (Luft)	1,4	287	300	1	0

4.2 Ideales Stoßwellenrohr

Ein in der Literatur weit verbreiteter Testfall ist das ideale Stoßwellenrohr nach Sod [47]. In zwei Hälften eines Rohres mit konstantem Querschnitt wird das Gas so initialisiert, daß es einen Hoch- und einen Niederdruckteil bildet. Hoch- und Niederdruckteil können zudem verschiedene Gase enthalten. Nach dem Start der Simulation breitet sich im Niederdruckteil des Rohres eine Stoßwelle aus, die das Testgas im Ruhezustand (1) in den Zustand (2) hinter der Stoßwelle verdichtet. Dem Stoß folgt die Kontaktfläche, die den Zustand (2) des Testgases vom Zustand (3) des Treibgases trennt. Gleichzeitig läuft in den Hochdruckteil eine Expansionswelle, die das Treibgas aus dem Ruhezustand (4) über mehrere Zwischenzustände in den Zustand (3) expandiert.

Abbildung 4.5 zeigt eine schematische Darstellung des Vorgangs. Bei dem idealen Stoßrohr handelt es sich um ein 1-dimensionales Problem, für das eine analytische Lösung existiert. Für die numerische Simulation wird ein äquidistantes Netz mit 11×1001 Punkten verwendet. Es wurden zwei Fälle untersucht. Als Testgas wird jeweils Luft verwendet. Als Treibgas dient im ersten Fall Luft im zweiten Helium. Tabelle 4.2 enthält neben den Gaskonstanten die Anfangsbedingung der untersuchten Fälle. Beide Gase werden als kalorisch ideal und reibungsfrei betrachtet. Für die Zeitintegration wird ein 2-Schritt Runge-Kutta Verfahren mit globalem Zeitschritt verwendet.

Die Abbildungen 4.6 und 4.7 zeigen Dichte-, Geschwindigkeits- und Temperaturverteilungen entlang der Rohrachse für beide Fälle. Der Zeitpunkt beträgt 312,5 bzw. 218,6 μs nach Start der Simulation. Die in Klammern angegebenen Zustände entsprechen denen in Abbildung 4.5. Die Zeitpunkte sind jeweils so gewählt, daß der Stoß die Position $x=0,45$ m erreicht. Die Stoßgeschwindigkeit beträgt 1440,2 bzw. 2058,2 m/s, das entspricht einer Stoßmachzahl von 4,1 bzw. 5,8. Numerische Simulation und analytische Lösung zeigen eine gute Übereinstimmung. Abbildung 4.8 zeigt die Vorgänge im heliumgetriebenen Stoßwellenrohr

**Abbildung 4.5:** Zustände im idealen Stoßwellenrohr.

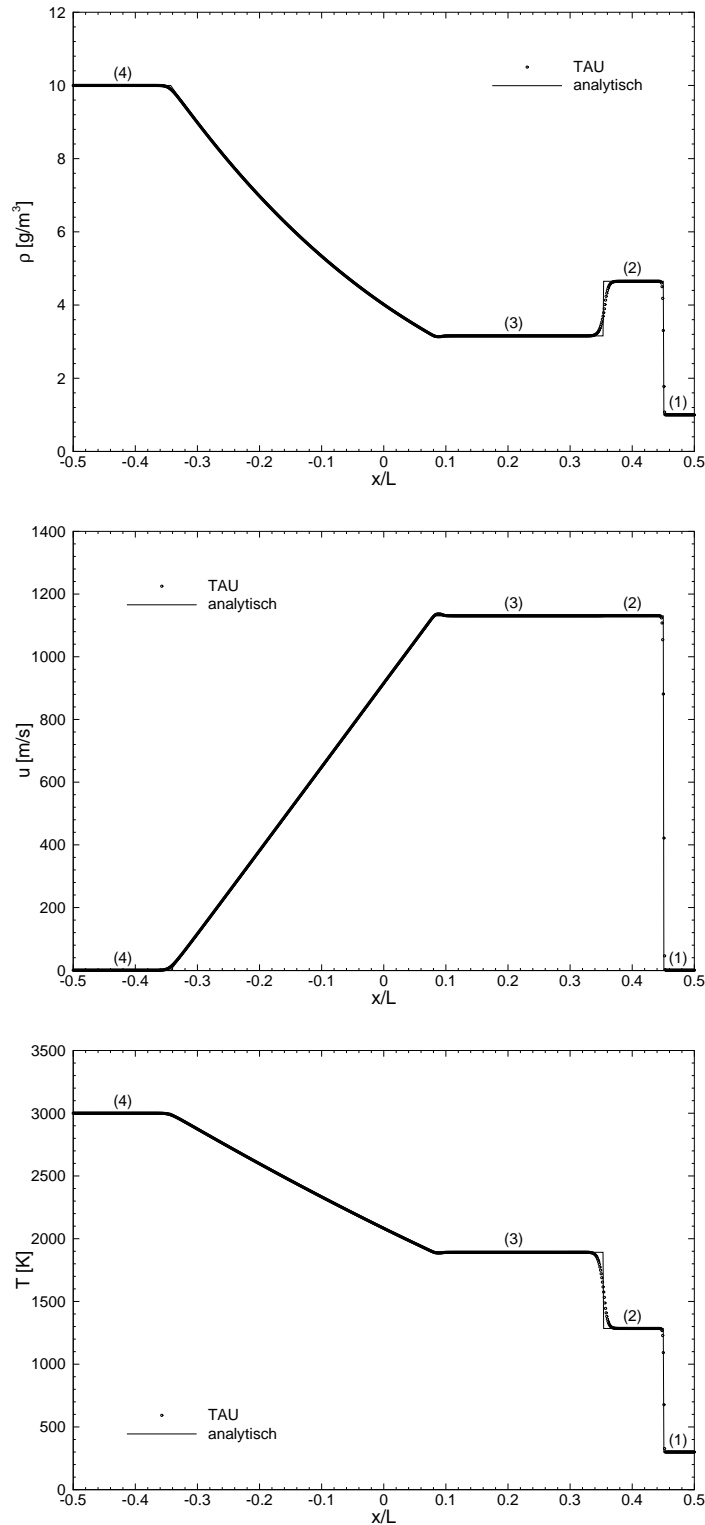


Abbildung 4.6: Berechneter Strömungszustand im idealen Stoßwellenrohr mit Luft als Treibgas. Dargestellt sind die Verläufe von Dichte, Geschwindigkeit und Temperatur entlang der Rohrachse nach $312,5 \mu\text{s}$.

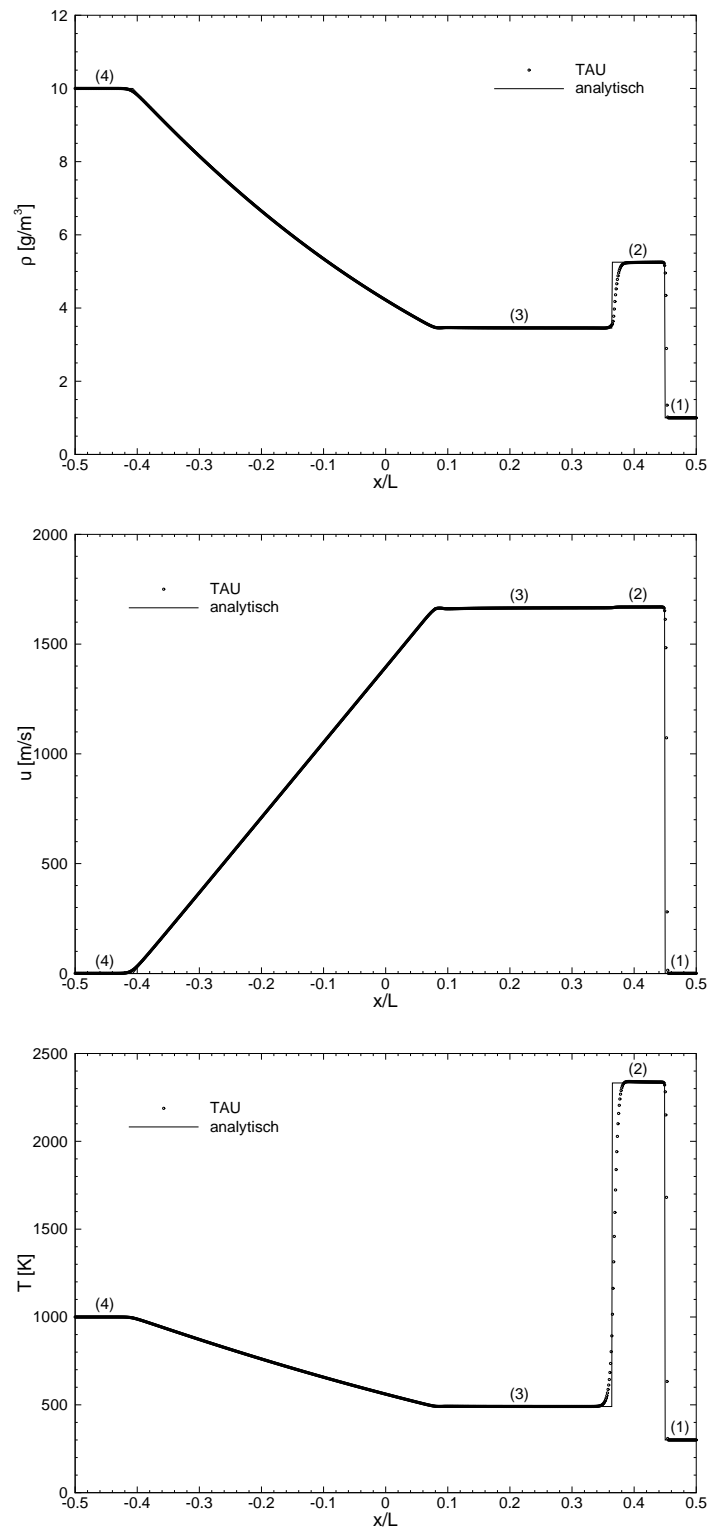


Abbildung 4.7: Berechneter Strömungszustand im idealen Stoßwellenrohr mit Helium als Treibgas. Dargestellt sind die Verläufe von Dichte, Geschwindigkeit und Temperatur entlang der Rohrachse nach $218,6 \mu\text{s}$.

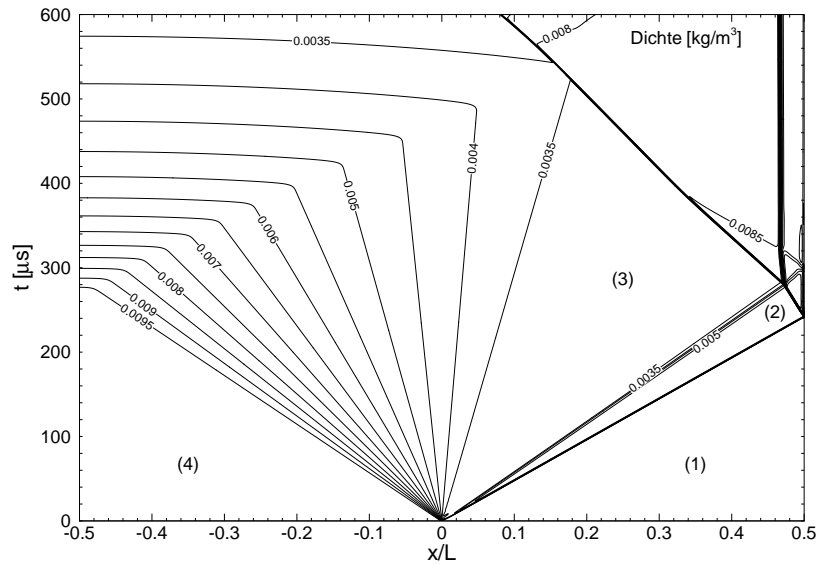


Abbildung 4.8: Weg-Zeit Diagramm für das ideale Stoßwellenrohr. Dargestellt sind Linien konstanter Dichte für den Fall des heliumgetriebenen Stoßwellenrohres.

anhand von Isochoren im Weg-Zeit Diagramm. Der dargestellte Zeitbereich umfaßt auch die Wechselwirkung mit den Endwänden des Rohres. Nachdem der Stoß von der Endwand des Niederdruckteiles reflektiert wurde, wechselwirkt er mit der Kontaktfläche zwischen Treib- und Testgas und bringt diese zum Stillstand. Bei dieser Wechselwirkung durchdringt ein Teil des Stoßes die Kontaktfläche während ein zweiter an ihr reflektiert wird. Dieser reflektierte Anteil läuft wieder in Richtung Endwand und wird erneut reflektiert. Die Expansionswellen reflektieren an der Endwand des Hochdruckteils.

4.3 Stoß-Grenzflächen Interaktion

Die Fähigkeit des Verfahrens die Wechselwirkung eines Stoßes und einer Grenzfläche zwischen verschiedenen Gasen zu simulieren, wird anhand der von Haas und Sturtevant [18] experimentell untersuchten Interaktion eines senkrechten Verdichtungsstoßes mit einer sich in Luft befindenden zylindrischen Helium- bzw. Difluorchlormethanblase (CHClF_2) validiert. Numerische Simulationen dieser Konfiguration wurden unter anderem von Quirk und Karni [39] durchgeführt. Eine Gasblase von 50 mm Durchmesser befindet sich dabei in einem Kanal mit einer Höhe von 89 mm und einer Länge von 890 mm. Die mit Helium bzw. Difluorchlormethan gefüllte Blase ist mit ihrer Umgebung im mechanischen und thermischen Gleichgewicht, d. h. Druck und Temperatur im Inneren der Blase entsprechen der Umgebungsluft. Zu Beginn der Simulation wird der Zustand des Gases 222,5 mm stromauf der Blase so initialisiert, daß er dem Zustand hinter einem senkrechten Verdichtungsstoß mit einer Stoßmachzahl von $Ma_s = 1,22$ entspricht. Abbildung 4.9 zeigt schematisch den Simulationsbereich und die Anordnung von Blase und Stoß zum Startzeitpunkt. Tabelle

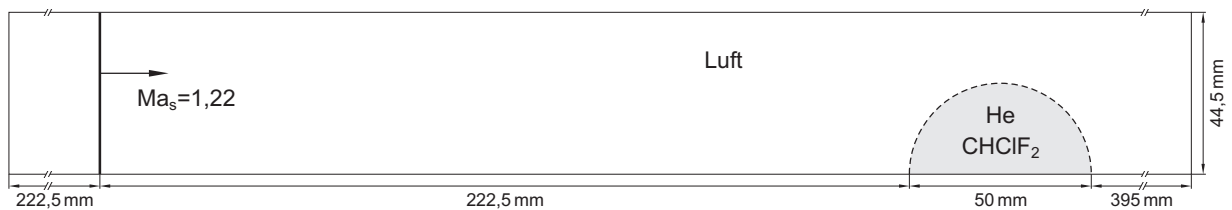
Tabelle 4.3: Testfalldefinition für die Simulation der Stoß-Blasen Wechselwirkung.

Gas	γ	R/M [J/(kg K)]	T [K]	ρ [g/m ³]	u [m/s]
He-Blase (28% Luft)	1,648	1578	298,0	215,473	0,0
CHClF ₂ -Blase	1,249	91	298,0	3736,448	0,0
Luft (in Ruhe)	1,4	287	298,0	1184,727	0,0
Luft (nach Stoß)	1,4	287	339,881	1630,616	115,438

4.3 enthält neben den Gaseigenschaften die Anfangswerte der Strömungsgrößen. Die Simulation wird 2-dimensional und reibungsfrei durchgeführt, aus Symmetriegründen reicht es aus eine Hälfte des Kanals zu berechnen. Der untere Rand des Rechengebietes ist demnach als Symmetrierand, der obere als feste Wand modelliert. An den Ränder links und rechts sind Ein- bzw. Ausflußrandbedingungen gesetzt. Alle Gase werden als kalorisch ideal betrachtet. Abbildung 4.10 zeigt einen 325 mm langen Ausschnitt des Rechennetzes. Im oberen Teil ist das Hintergrundnetz, im unteren Teil das anhand der Startlösung voradaptierte Netz dargestellt. Das Hintergrundnetz hat 4786 Punkte (8982 Dreiecke) das 10-fach voradaptierte Startnetz 16681 Punkte (32730 Dreiecke). Die minimale Kantenlänge, bis zu der eine Kante geteilt wird, liegt bei 0,125 mm. Die simulierte Zeit zwischen zwei Adaptionszyklen beträgt 5 μ s. Dieser Zeitschritt ist so gewählt, daß die Stoßwelle den verfeinerten Bereich des Netzes nicht verläßt. Nach 527 μ s erreicht der Stoß den äußeren Rand der Blase. Bis zu diesem Zeitpunkt wird die Anzahl der Punkte auf 20000 beschränkt. Danach wird, um den komplexeren Strukturen Rechnung zu tragen, die Punktzahl mit jedem Adaptionsschritt um 500 bis zu einer absoluten Obergrenze von 25000 erhöht. Abbildung 4.11 zeigt das Fortschreiten der Adaption anhand von drei Rechennetzen zu verschiedenen Zeitpunkten. Bezogen auf das Hintergrundnetz wurden 1127, 1227 und 2411 Adaptionszyklen durchlaufen. Die zugehörigen Lösungen sind in Abbildung 4.12 (a), (e) und (i) dargestellt.

Bei der Wechselwirkung zwischen Stoß und Kontaktfläche wird ein Teil der Welle an der Mediengrenze reflektiert und ein Teil in das angrenzende Medium transmittiert. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit beider Wellen hängt von der Schallgeschwindigkeit und somit vom Zustand und den Eigenschaften des jeweiligen Mediums ab. Im Fall der hier untersuchten Wechselwirkung wirkt die Blase in Form eines Zylinders wie eine akustische Linse auf die einlaufende Welle.

Abbildung 4.12 zeigt die Ergebnisse der TAU Simulation für die Heliumblase im Vergleich

**Abbildung 4.9:** Rechengebiet für die Stoß-Blasen Wechselwirkung.

mit experimentellen Ergebnissen von Haas und Sturtevant [18]. Im oberen Teil der Bilder ist jeweils das numerisch berechnete im unteren Teil das von Haas und Sturtevant während des Experiments aufgenommene Bild zu sehen. Die angegebenen Zeiten beziehen sich auf den Zeitpunkt des ersten Kontakts zwischen Stoß und Blase. Die gestrichelte Linie zeigt die Form und Position der ursprünglichen Blase.

Abbildung 4.12 (a) zeigt den an der Kontaktfläche reflektierten und den in die Blase transmittierten Anteil des Stoßes. Aufgrund der höheren Schallgeschwindigkeit des Heliums breitet sich die Welle innerhalb der Blase schneller aus. Die Kontaktfläche wird durch den Stoß beschleunigt. Abbildung 4.12 (b) bis (d) zeigen wie die transmittierte Stoßwelle das gegenüberliegende Ende der Heliumblase erreicht und wieder in die Umgebungsluft eintritt. Die, an dieser Mediengrenze reflektierte Welle läuft stromauf und tritt in Abbildung 4.12 (f) wieder durch die stromaufseitige Kontaktfläche. Die horizontalen Stoßwellen in Abbildung 4.12 (g) wurden von den Kanalwänden reflektiert. Außerdem zeigt die Kontaktfläche eine Instabilität, die als Richtmyer-Meshkov Instabilität bezeichnet wird und bei der impulsartigen Beschleunigung von Grenzflächen zwischen unterschiedlich dichten Gasen auftritt. Abbildung 4.12 (h) bis (j) zeigen das Fortschreiten der Verformung der Blase. Dabei bildet sich ein Strahl bestehend aus der umgebenden Luft, der in die leichtere Heliumblase eindringt. Erreicht dieser Strahl die gegenüberliegende Grenzfläche zur dichteren Luft wird er unter Bildung eines Wirbelpaares seitlich abgelenkt.

Während der Vergleich zwischen Experiment und Numerik mit fortgeschrittener Zeit sehr gute Übereinstimmung zeigt, ist diese zu Beginn weniger gut. Wie in den ersten Bildern zu sehen ist, laufen die Vorgänge im Inneren der Blase zu schnell ab. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit des transmittierten Stoßes ist in der Simulation deutlich größer als im Experiment. Vergleicht man jedoch die Positionen der sich in der umgebenden Luft ausbreitenden reflektierten und primären Stoßwelle, erhält man eine sehr gute Übereinstimmung. Eine Erklärung wäre, daß der Zustand und somit die Schallausbreitung innerhalb der Heliumblase in der Simulation nicht der Gleiche wie im Experiment ist. Haas und Sturtevant geben für das Gas innerhalb der Blase eine Verunreinigung mit Luft von 28% an, was zu einer Verminderung der Schallgeschwindigkeit gegenüber reinem Helium führt. Dieser Umstand wurde bei der Simulation berücksichtigt. Vom Autor durchgeführte Si-

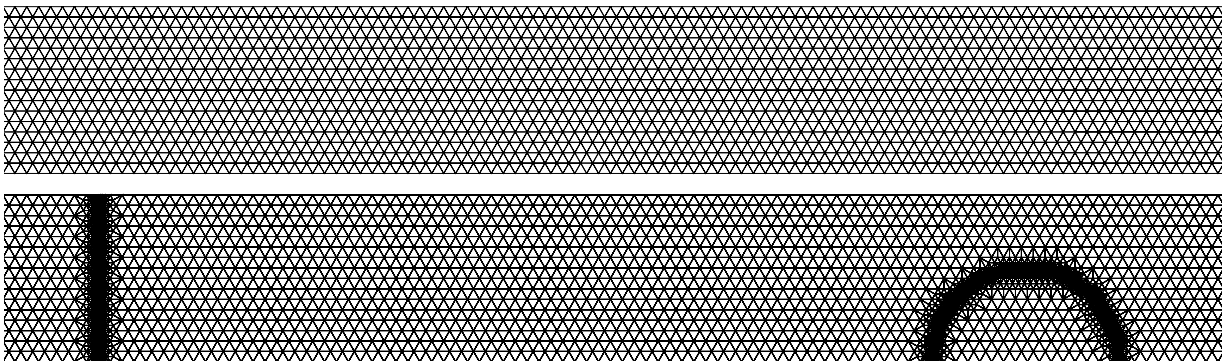


Abbildung 4.10: Rechenetze für die Stoß-Grenzflächen Simulation. Hintergrundnetz (oben) und voradaptiertes Startnetz (unten).

mulationen mit einem höheren Verunreinigungsgrad zeigen zwar eine Verbesserung der Übereinstimmung der Stoßausbreitung innerhalb der Blase, jedoch eine deutlich schlechtere Übereinstimmung der Deformation der Kontaktfläche zu einen späteren Zeitpunkt. Abbildung 4.13 zeigt den Vergleich der Experimenten mit der Simulation bei einer angenommenen Verunreinigung des Heliums mit 68% Luft. Eventuell spielt auch der Einfluß der Membran, die zu Beginn des Versuchs beide Gase voneinander trennt, eine Rolle. Haas und Sturtevant verwenden dafür eine $0,5\,\mu\text{m}$ starke Folie aus Nitrozellulose. In Abbildung 4.14 wurde für die Ergebnisse der Simulation mit 28% Luft eine zeitliche Verzögerung beim Eintreten der Stoßwelle in die Heliumblase von $11,5\,\mu\text{s}$ berücksichtigt. Dieses Vorgehen führt zu einer deutlich besseren Übereinstimmung mit den Experimenten. Haas und Sturtevant machen allerdings keine Angaben über den Einfluß der Membran, so daß die Ursache für die schlechte Übereinstimmung im Inneren der Blase letztlich nicht vollständig geklärt werden konnte.

Die Ergebnisse der Simulation der zylindrischen Difluorchlormethanblase zeigt Abbildung 4.15. Wiederum zeigt der obere Teil der Einzelbilder die Ergebnisse der TAU Rechnung, während im unteren Teil Ergebnisse von Haas und Sturtevant zu sehen sind. Die angegebenen Zeiten beziehen sich wieder auf den ersten Kontakt zwischen Stoß und Blase, deren ursprüngliche Position durch die gestrichelte Linie gekennzeichnet ist. Abbildung 4.15 (a) und (b) zeigt den an der Kontaktfläche reflektierten und den transmittierten Stoß im Inneren der Blase. Aufgrund der geringeren Schallgeschwindigkeit von Difluorchlormethan im Vergleich zur Luft außerhalb bleibt der Stoß im Inneren der Blase gegenüber der primären Stoßwelle zurück. Die primäre Stoßwelle krümmt sich im Nachlauf des Gaszylinders. Die reflektierte Welle wird wiederum von den Kanalwänden reflektiert und ist in Abbildung 4.15 (c) am oberen und unteren Bildrand zu sehen. Die transmittierte Stoßwelle fokussiert in

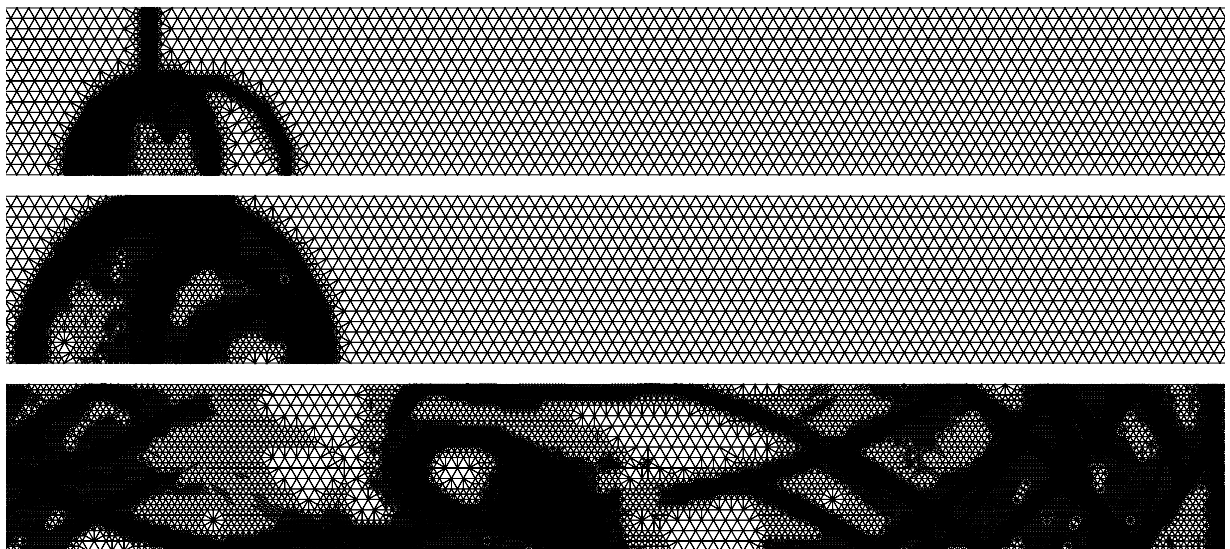


Abbildung 4.11: Instationäre Netzadaption. Dargestellt sind die Rechenetze nach 1127, 1227 und 2411 Adaptionenzyklen. Die zugehörigen Lösungen sind in Abbildung 4.12 (a), (e) und (i) dargestellt.

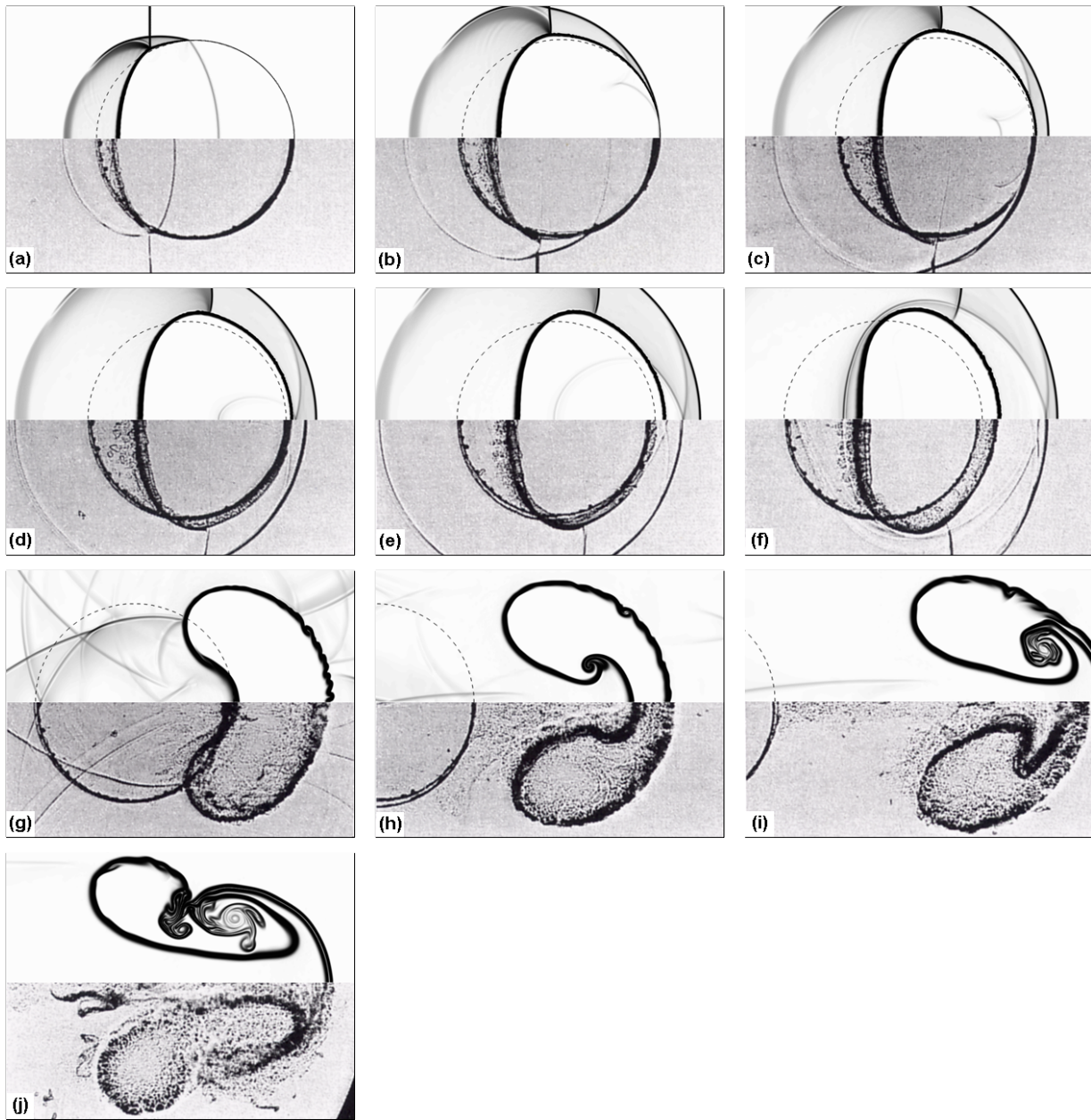


Abbildung 4.12: Ergebnisse der Simulation der Heliumblase. Vergleich von Schattenaufnahmen der numerischen Simulation (oben) mit experimentellen Ergebnisse von Haas und Sturtevant [18] (unten) für eine zylindrische Heliumblase. Die Zeiten beziehen sich auf den Zeitpunkt des ersten Kontakts des Stoßes mit der Blase. (a) $32 \mu\text{s}$, (b) $52 \mu\text{s}$, (c) $62 \mu\text{s}$, (d) $72 \mu\text{s}$, (e) $82 \mu\text{s}$, (f) $102 \mu\text{s}$, (g) $245 \mu\text{s}$, (h) $427 \mu\text{s}$, (i) $674 \mu\text{s}$ und (j) $983 \mu\text{s}$. Die gestrichelte Linie zeigt die ursprüngliche Position der Blase.

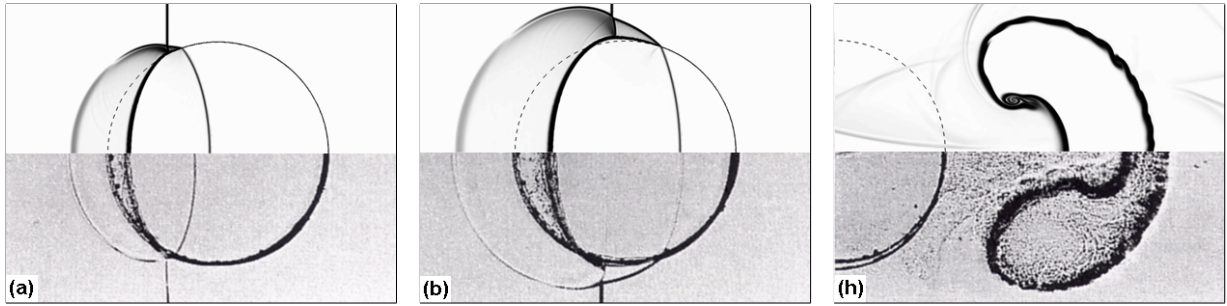


Abbildung 4.13: Ergebnisse der Simulation der Heliumblase mit einer Verunreinigung von 68% Luft (oben), Schattenaufnahmen von Haas und Sturtevant [18] (unten). (a) $32 \mu\text{s}$, (b) $52 \mu\text{s}$ und (h) $427 \mu\text{s}$.



Abbildung 4.14: Ergebnisse der Simulation der Heliumblase unter Berücksichtigung einer Zeitverzögerung. Vergleich der numerischen Simulation der Heliumblase (oben) mit Schattenaufnahmen von Haas und Sturtevant [18] (unten). (a) $32 \mu\text{s}$, (b) $52 \mu\text{s}$ und (h) $427 \mu\text{s}$. Im Gegensatz zum ursprünglichen Vergleich in Abbildung 4.12 wurde in den numerischen Daten eine zeitliche Verzögerung von $11,5 \mu\text{s}$ berücksichtigt.

Abbildung 4.15 (d) am inneren Rand der Grenzfläche und expandiert in Abbildung 4.15 (e) als zylinderförmige Stoßwelle in die umgebende Luft. Abbildung 4.15 (f) zeigt diesen Stoß hinter den im Nachlauf gebeugten Ästen der Primärwelle, die in der Symmetrieebene unter Bildung einer Machreflexion interagieren. Durch die Fokussierung der Stoßwelle im Inneren der Blase bildet sich in der Symmetrieebene ein stromab gerichteter Difluorchlormethanstrahl, dessen Entwicklung die Abbildungen 4.15 (e) bis (i) zeigen. Tritt die Stoßwelle aus dem Inneren der Blase wieder in die Umgebungsluft ein, wird an dieser Mediengrenze wiederum ein Anteil der Welle reflektiert. Abbildung 4.15 (g) und (h) zeigt diese stromauf laufende reflektierte Welle innerhalb und außerhalb der Gasblase. Die beschleunigte Kontaktfläche wird instabil und rollt sich auf. Nach längerer Zeit wird das in Abbildung 4.15 (i) dargestellte Wirbelpaar beobachtet. Eine zeitliche Verzögerung beim Übergang der Stoßwelle zwischen beiden Gasen, ähnlich der heliumgefüllten Blase, wird nicht beobachtet.

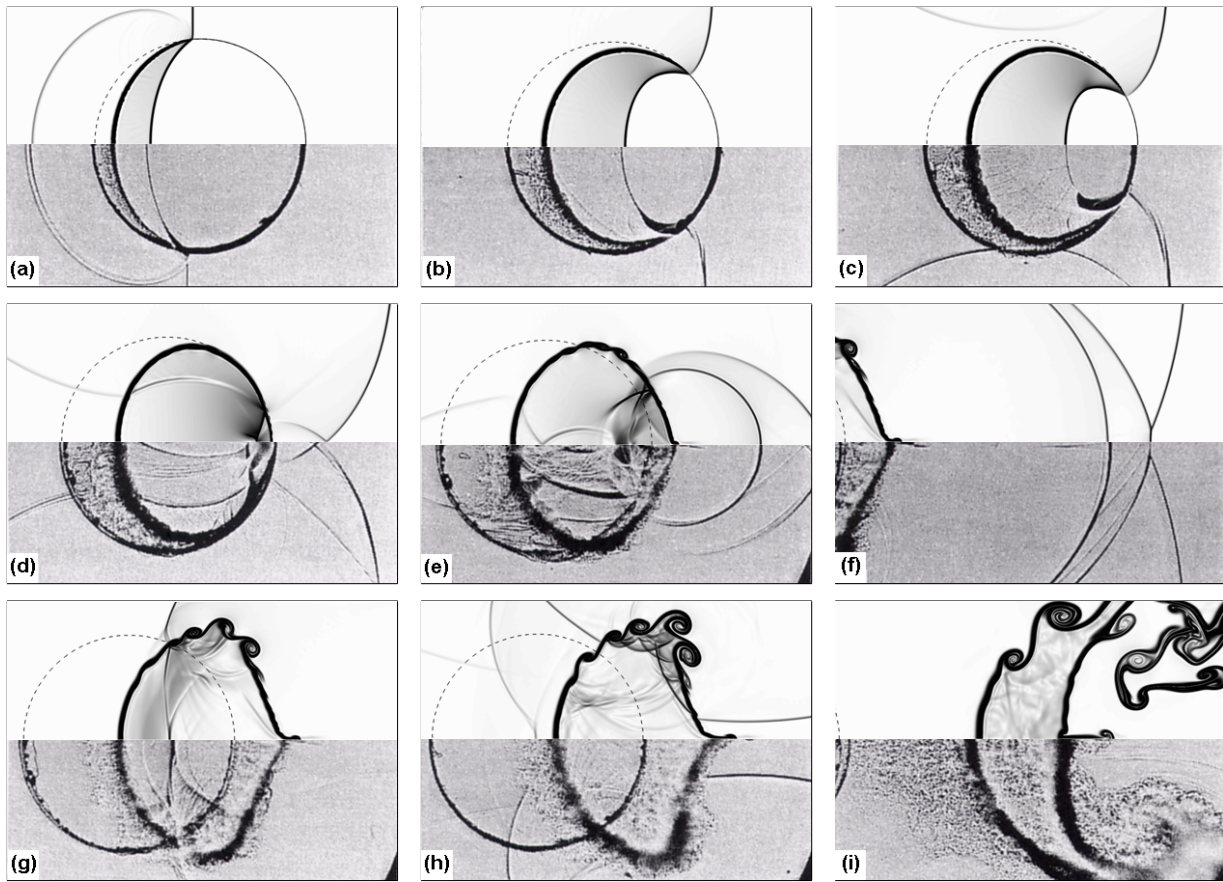


Abbildung 4.15: Simulation der Difluorchlormethanblase. Vergleich von Schattenaufnahmen der numerischen Simulation (oben) mit experimentellen Ergebnisse von Haas und Sturtevant [18] (unten) für eine zylindrische Difluorchlormethanblase. Die Zeiten beziehen sich auf den Zeitpunkt des ersten Kontakts des Stoßes mit der Blase. (a) $55 \mu\text{s}$, (b) $115 \mu\text{s}$, (c) $135 \mu\text{s}$, (d) $187 \mu\text{s}$, (e) $247 \mu\text{s}$, (f) $318 \mu\text{s}$, (g) $342 \mu\text{s}$, (h) $417 \mu\text{s}$, (i) $1020 \mu\text{s}$. Die gestrichelte Linie zeigt die ursprüngliche Position der Blase.

5 Stoßrohrströmung im Hochenthalpiekanal Göttingen

5.1 Rechengebiet und -netz

Das Rechengebiet für die Simulation des Hochenthalpiekanals umfaßt die letzten 1,125 m des Stoßrohres sowie 0,15 m des Düsen Eintritts, dadurch ist sichergestellt, daß in der Ausströmebene Überschallströmung vorherrscht. Eine Simulation der Düse ist aufgrund der bei der Expansion auftretenden starken Nichtgleichgewichtseffekte mit dem verwendeten Gleichgewichtsmodell nicht sinnvoll. Das Stoßrohr hat einen Durchmesser von 0,15 m, was auch der Länge des Heliumabscheiders entspricht. Abbildung 5.1 zeigt das unadaptierte hybride Rechnetz. Das Netz enthält 41303 Punkte; zur Auflösung der Grenzschicht dienen 40 Hexaederschichten entlang der Wände. Der Wandabstand der ersten Zelle beträgt an der Stoßrohrseitenwand 75 nm. Die Netzzellen werden bis zu einer minimalen Kantenlänge von 0,3 mm adaptiert. Um nach der Initialisierung des ungestörten Testgaszustandes ein möglichst störungsfreies Einlaufen der Stoßwelle zu garantieren, wird das Netz am Einströmrand zu Beginn der Rechnung bis zur minimalen Kantenlänge voradaptiert. Dieses Vorgehen wird beim Einströmen des Treibgases wiederholt. Während der Rechnung wird das Netz nach einem Zeitschritt von 50 ns adaptiert, um sicherzustellen, daß die primäre Stoßwelle nicht über den verfeinerten Netzbereich hinausläuft. Bei jeder Netzadaption wird eine Verschiebung von 50% der Punkte zugelassen. Dabei wird die Anzahl der Punkte schrittweise bis auf 500000 erhöht. Um sowohl Stoßwellen, als auch Kontaktunstetigkeiten mittels der lokalen Netzadaption verfolgen zu können, wird ein aus Druck und Temperatur im Verhältnis 0,6 zu 0,4 gewichteter differenzenbasierter Indikator zur Detektion der zu teilenden Kanten verwendet.

5.2 Strömung am Einströmrand

Da nur ein Teilstück des Stoßrohres simuliert wird, ergibt sich, wie schon erläutert wurde, ein zeitabhängiger Einströmrand. Die zeitliche Entwicklung der turbulenten Wandgrenzschicht wird durch eine spezielle Randbedingung auf Basis der Theorie von Mirels [34] in



Abbildung 5.1: Ausgangsnetz zur Berechnung der Strömung im Hochenthalpiekanal Göttingen.

Kapitel 3 beschrieben. Die dabei verwendete Bedingung am Grenzschichttrand wird mit Hilfe der Rankine-Hugoniot-Gleichung für Gase im thermochemischen Gleichgewicht aus der experimentell bestimmten Stoßgeschwindigkeit von 4700 m/s und dem ungestörten Zustand des Testgases im Stoßrohr ermittelt.

Da experimentelle Daten nicht vorliegen, wird der Zustand und der Zeitpunkt des Einströmens des Treibgases mit Hilfe des 1-dimensionalen Simulationsverfahrens L1d bestimmt. Bei dem von Jacobs [22] entwickelten Verfahren handelt es sich um ein Lagrangeverfahren zur Berechnung kompletter Anlagen. Hauptsächlich wird das Verfahren bei der Auslegung von Betriebszuständen eingesetzt. Eine Berechnung der verschiedenen Betriebszustände des Hochenthalpiekanal Göttingen wurde unter anderem von Jacobs und Gardner [23] durchgeführt.

Abbildung 5.2 zeigt anhand von Isolinen der Temperatur im Weg-Zeit Diagramm das Ergebnis einer vom Autor durchgeführten Berechnung der HEG Strömung für Versuchsbedingung I. Der dargestellte Bereich deckt den Bereich des Rechengebietes der axialsymmetrischen TAU Simulation ab. Der Ursprung des Koordinatensystems wurde so gewählt, daß $x = 0$ der Position der Stoßrohrendwand und $t = 0$ dem Zeitpunkt der Reflexion des Stoßes an der Endwand entspricht.

Abbildung 5.3 zeigt den mit L1d ermittelten zeitlichen Verlauf des Gaszustandes 1,125 m vor der Endwand des Stoßrohres. Diese Position entspricht dem Einströmrand der axialsymmetrischen TAU Rechnung. Zusätzlich ist der zeitliche Verlauf der Einströmrandbedingung für die TAU Rechnung dargestellt. Die L1d Lösung zeigt im Bereich der Kontaktfäche eine Mischungszone, die in der TAU Simulation nicht realisiert wird. Der Zeitpunkt des Erreichens konstanter Dichte in der L1d Rechnung bei $t = 35,5 \mu\text{s}$ wird als Einströmzeitpunkt, die konstante Temperatur stromab der Mischungszone als Einströmtemperatur des

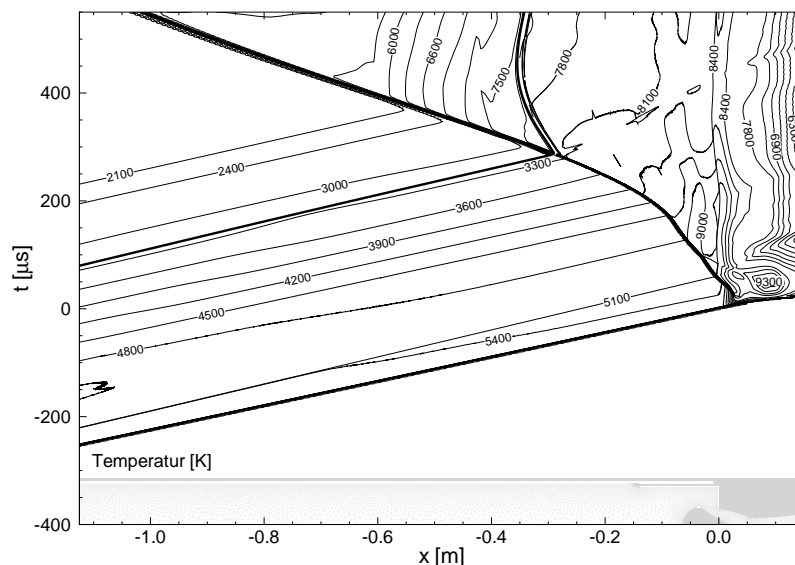


Abbildung 5.2: Weg-Zeit Diagramm der HEG Strömung berechnet mit L1d. Dargestellt sind Linien konstanter Temperatur.

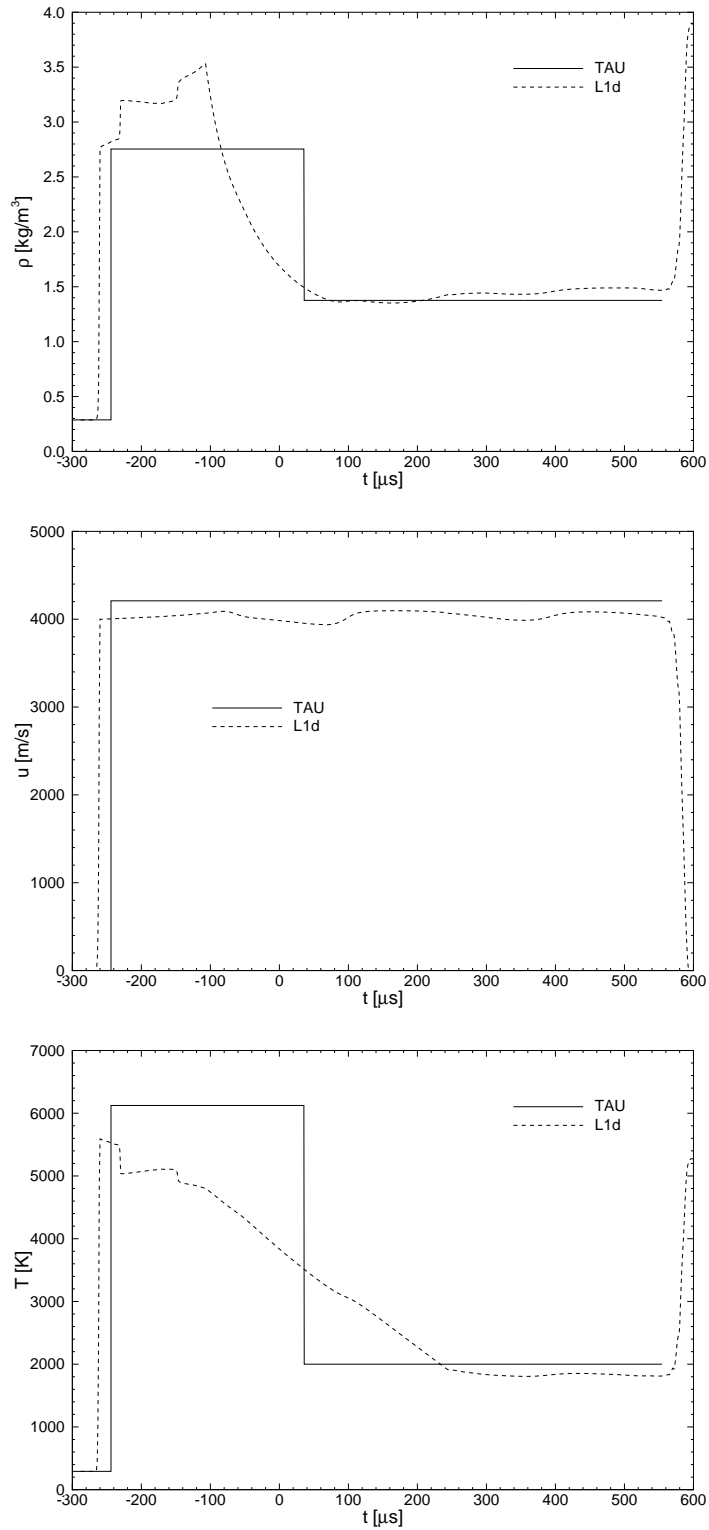


Abbildung 5.3: Zeitlicher Verlauf der Strömungsgrößen auf dem Einströmrand für die HEG Simulation. Vergleich der mit L1d berechneten Strömungsgrößen mit den für die TAU Simulation vorgegebenen Werten bei $x = -1,125 \text{ m}$

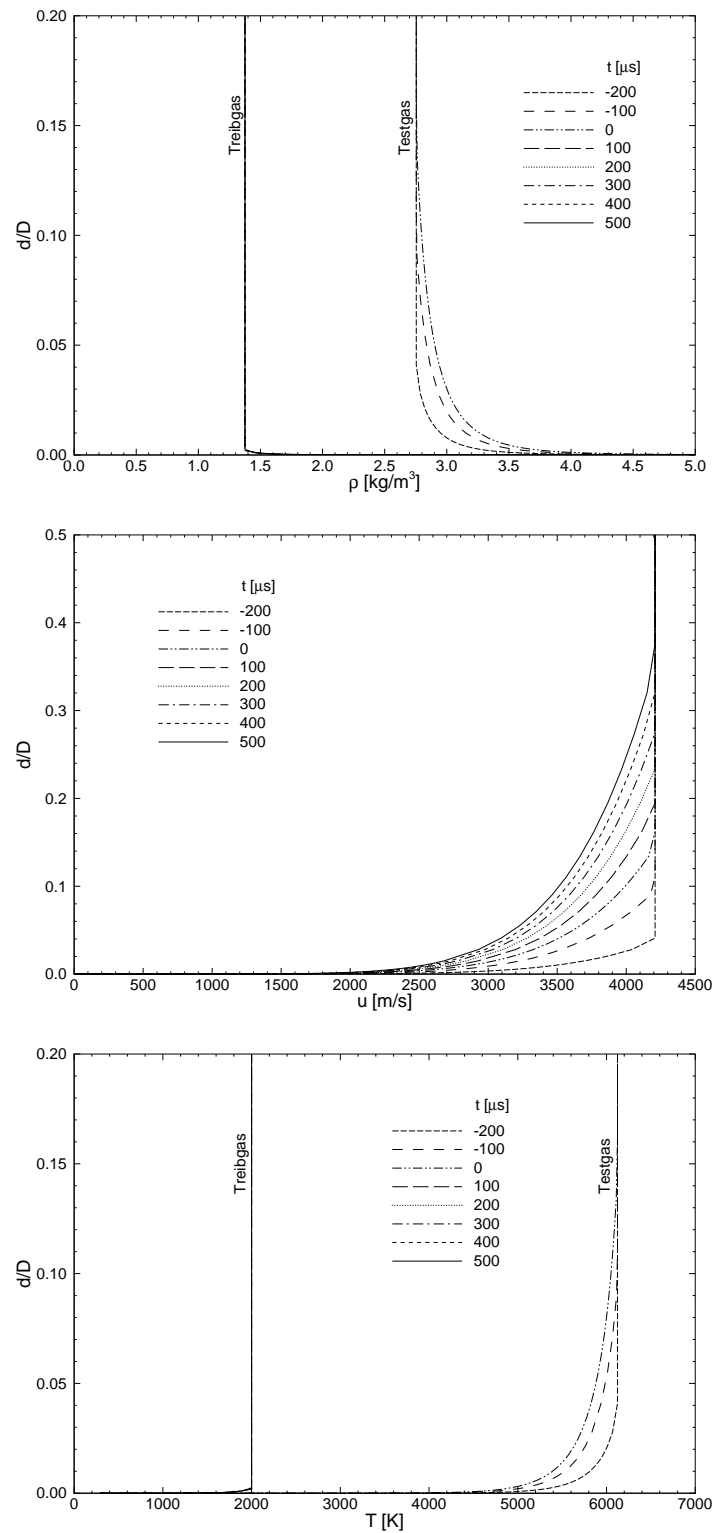


Abbildung 5.4: Zeitliche Entwicklung des Grenzschichtprofils am Einströmrand. Dargestellt sind Dichte-, Geschwindigkeits- und Temperaturverläufe als Funktionen des mit dem Rohrdurchmesser normierten Wandabstandes.

Tabelle 5.1: Einströmbedingung am Grenzschichttrand für die HEG Simulation.

Gas	t [μs]	T [K]	ρ_s [g/m^3]	u [m/s]	T_w [K]
Testgas (in Ruhe)	$t = -244,5$	292,0	287,64	0	292,0
Testgas (nach Stoß)	$-244,5 < t < 35,5$	6123,9	2754,19	4209,15	292,0
Treibgas	$t \geq 35,5$	2000,0	1375,66	4209,15	292,0

Treibgases gewählt. Der Unterschied in der Position der primären Stoßwelle ergibt sich aufgrund der Wahl des Zeitpunkts der Stoßreflexion als Nullpunkt und der im Vergleich zum Experiment etwas geringeren Stoßgeschwindigkeit der L1d Rechnung. Diese Differenz führt auch zu einer etwas niedrigeren induzierten Geschwindigkeit hinter der primären Stoßwelle. Tabelle 5.2 faßt die ermittelten Einströmbedingungen am Grenzschichttrand zusammen.

Abbildung 5.4 zeigt die in der TAU Rechnung zu verschiedenen Zeitpunkten am Einströmrand vorgegebenen Grenzschichtprofile. Deren Berechnung nach Abschnitt 3.4.4 erfolgt unter Verwendung der in Tabelle 5.2 gegebenen Strömungsgrößen am Grenzschichttrand.

Zu Beginn der Rechnung wird das gesamte Rechengebiet mit dem Zustand des sich in Ruhe befindenden Testgases initialisiert. Danach werden auf dem Rand bei $x=-1,125$ m die entsprechenden Zustände des einströmenden Test- bzw. Treibgases gesetzt. Die Rechnung

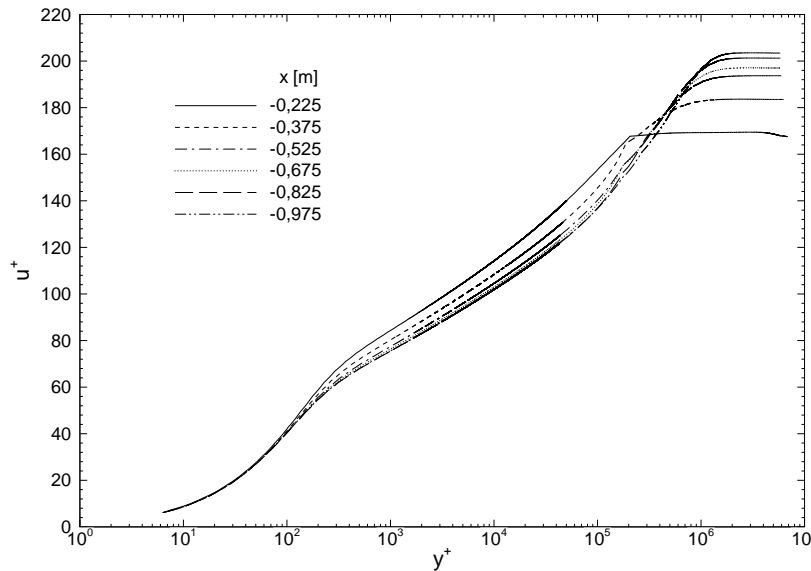


Abbildung 5.5: Dimensionsloses Geschwindigkeitsprofil der Stoßrohrgrenzschicht im HEG. Dargestellt sind die dimensionslose Geschwindigkeit u^+ als Funktion des dimensionslosen Wandabstandes y^+ . Die Daten wurden $35 \mu\text{s}$ vor Stoßreflexion an verschiedenen Positionen im Stoßrohr extrahiert. Die Stoßwelle befindet sich zu diesem Zeitpunkt ca. $0,162$ m vor der Endwand.

ist beendet, sobald die von der Endwand des Rohres reflektierte Stoßwelle wieder den Einströmrand erreicht.

Entscheidend für die Qualität der Simulation des Stoßbifurkationsprozesses ist die Auflösung der Stoßrohrgrenzschicht. Abbildung 5.5 zeigt die dimensionslose Geschwindigkeit u^+ als Funktion des dimensionslosen Wandabstandes y^+ . u^+ und y^+ sind dabei wie folgt definiert:

$$u^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad \text{bzw.} \quad y^+ = \sqrt{\frac{d u_\tau \rho_w}{\mu_w}} \quad (5.1)$$

mit der Schubspannungsgeschwindigkeit

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_w}} \quad . \quad (5.2)$$

Vor der Wand wird ein y^+ -Wert von ungefähr 6 erreicht. Ein Vergleich des Verlaufs mit theoretischen Profilen zeigt, daß der Übergangsbereich zwischen viskoser Unterschicht und der Schicht, in der ein logarithmisches Wandgesetz gilt, noch aufgelöst wird. Die viskose Unterschicht wird nicht erfaßt. Auf eine weitere Verfeinerung der strukturierten Unterschicht und der damit verbundenen Erhöhung des Streckungsverhältnisses der Wandzellen wird aufgrund der zu erwartenden Konvergenzprobleme verzichtet.

5.3 Konvergenz

Zur zeitlichen Integration wird das in Kapitel 3 beschriebene duale Zeitschrittverfahren in seiner impliziten Form verwendet. Um das zeitliche Konvergenzverhalten des Verfahrens zu untersuchen, wurde die Anzahl der inneren Zeitschritte variiert.

Abbildung 5.6 zeigt anhand von Linien konstanter Machzahl das Strömungsfeld kurz nach Stoßreflexion. Die Berechnung wurde jeweils mit 10, 30 und 60 inneren Zeitschritten durchgeführt. Alle Ergebnisse zeigen den von links oben ins Bild laufenden Stoß, der von der Vorderkante des Heliumabscheiders ausgeht, sowie den abgelösten Stoß vor dem Partikelstopper. Die bereits reflektierte primäre Stoßwelle steht direkt vor der Endwand. Die Lösung der Simulation mit 10 inneren Zeitschritten zeigt im Vergleich zu den anderen

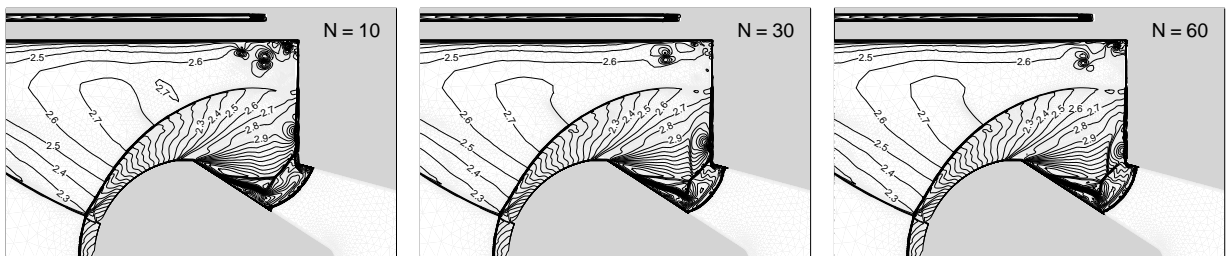


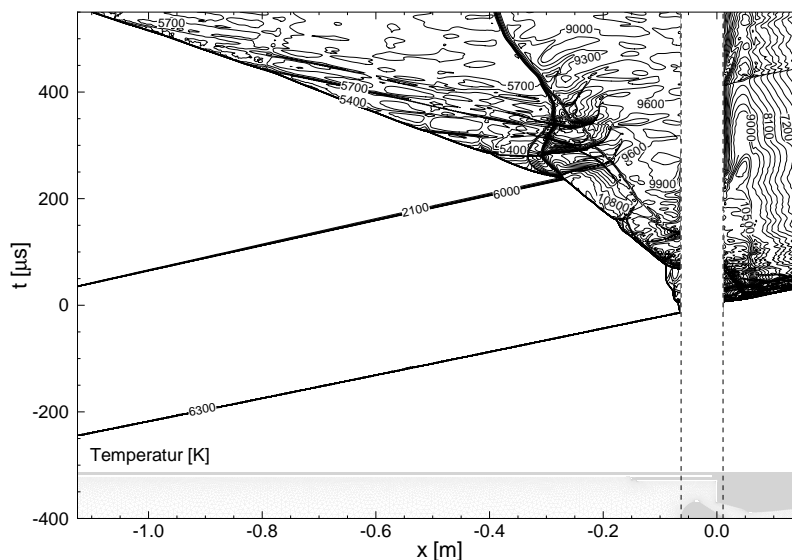
Abbildung 5.6: Konvergenzuntersuchung. Dargestellt ist das simulierte Strömungsfeld im Reservoir des HEG kurz nach Stoßreflexion anhand von Linien konstanter Machzahl gerechnet mit 10, 30 und 60 inneren Zeitschritten.

beiden Lösungen deutlich größere Störungen in Wandnähe direkt hinter der primären Stoßwelle. Außerdem werden nicht alle Strukturen des in den konvergenten Teil der Düse eintretenden Stoßsystems aufgelöst. Die mit 30 und 60 inneren Zeitschritten berechneten Lösungen zeigen keine signifikanten Unterschiede.

Für die weitere Berechnungen wurden deshalb als Kompromiß zwischen Genauigkeit und Rechenaufwand 30 innere Zeitschritte verwendet. Aufgrund des sich durch Hinzufügen und Herausnehmen von Punkten fortlaufend ändernden Rechnernetzes wurde eine Untersuchung der Netzkonvergenz der Lösung nicht durchgeführt. Um eine ähnliche räumliche Diskretisierung mit einem strukturierten Netz zu erreichen, benötigte man bei äquidistanter Teilung ca. 7,5 Millionen Punkte.

5.4 Diskussion der Ergebnisse der TAU Simulation

Abbildung 5.7 zeigt die mit TAU simulierte Stoßrohrströmung des HEG im Weg-Zeit Diagramm. Dargestellt sind Linien konstanter Temperatur. Da nur die Werte auf der Achse des Stoßrohres berücksichtigt wurden, liegen für den Bereich des Partikelstoppers keine Daten vor. Ein für die Wirksamkeit des Heliumabscheiders wichtiges Kriterium ist die Position der Wechselwirkung zwischen der reflektierten Stoßwelle und der Treibgasfront. Ein Vergleich mit der L1d Simulation in Abbildung 5.2 zeigt eine gute Übereinstimmung des Wechselwirkungspunktes bei etwa 0,3m vor Ende des Stoßrohres. Während in der TAU Rechnung der Zustand des Testgases aufgrund der vorgegebenen Randbedingung zwischen Stoß und Kontaktfläche nahezu konstant ist, führt die Mischungszone in der L1d Simulation zu einer vorzeitigen Beschleunigung der reflektierten Stoßwelle. Die TAU



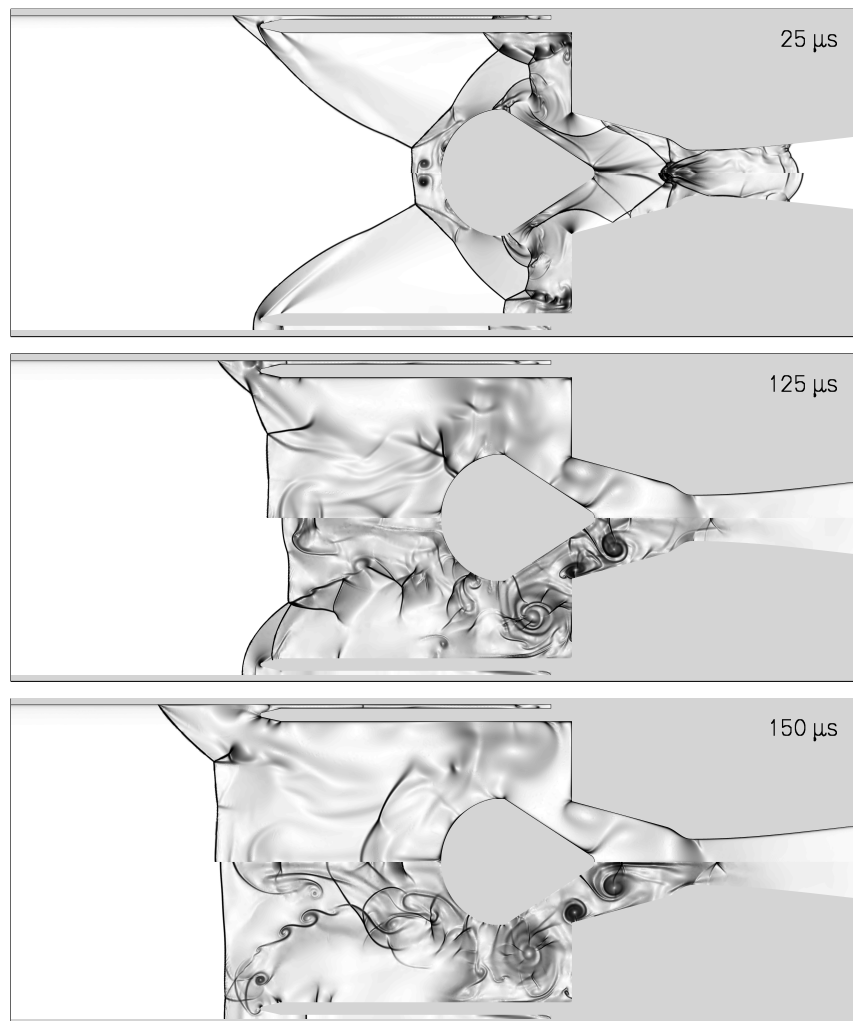


Abbildung 5.8: Einfluß der Viskosität auf die Stoßrohrströmung im HEG. Vergleich zwischen reibungsbehafteter (oben) und reibungsfreier Simulation (unten) anhand rekonstruierter Schlierenbilder.

Lösung zeigt eine Beschleunigung der reflektierten Welle erst innerhalb des Treibgases.

Vor der reibungsbehafteten wurde eine reibungsfreie Simulation der HEG Strömung durchgeführt. Abbildung 5.8 zeigt einen Vergleich der beiden Ergebnisse anhand rekonstruierter Schlierenbilder. Dabei ist im oberen Teil jedes Bildes das reibungsbehaftete, im unteren Teil das reibungsfreie Strömungsfeld jeweils zu gleichen Zeiten dargestellt. Aufgrund der fehlenden inneren Reibung und somit der Wandgrenzschicht zeigt die reibungsfreie Strömung keine Bifurkation der reflektierten Stoßwellen. Aus demselben Grund zeigt die reibungsfreie Lösung trotz ähnlicher räumlicher Diskretisierung deutlich mehr Strukturen wie Wirbel und Scherschichten.

Die Abbildungen 5.9 und 5.10 zeigen anhand einer Serie rekonstruierter Schlierenbilder das berechnete Strömungsfeld im Stoßrohr des HEG im Bereich von $50\ \mu\text{s}$ vor, bis $475\ \mu\text{s}$ nach Stoßreflexion. Der zeitliche Abstand der Bilder beträgt $25\ \mu\text{s}$. Ausschnittsvergrößerungen

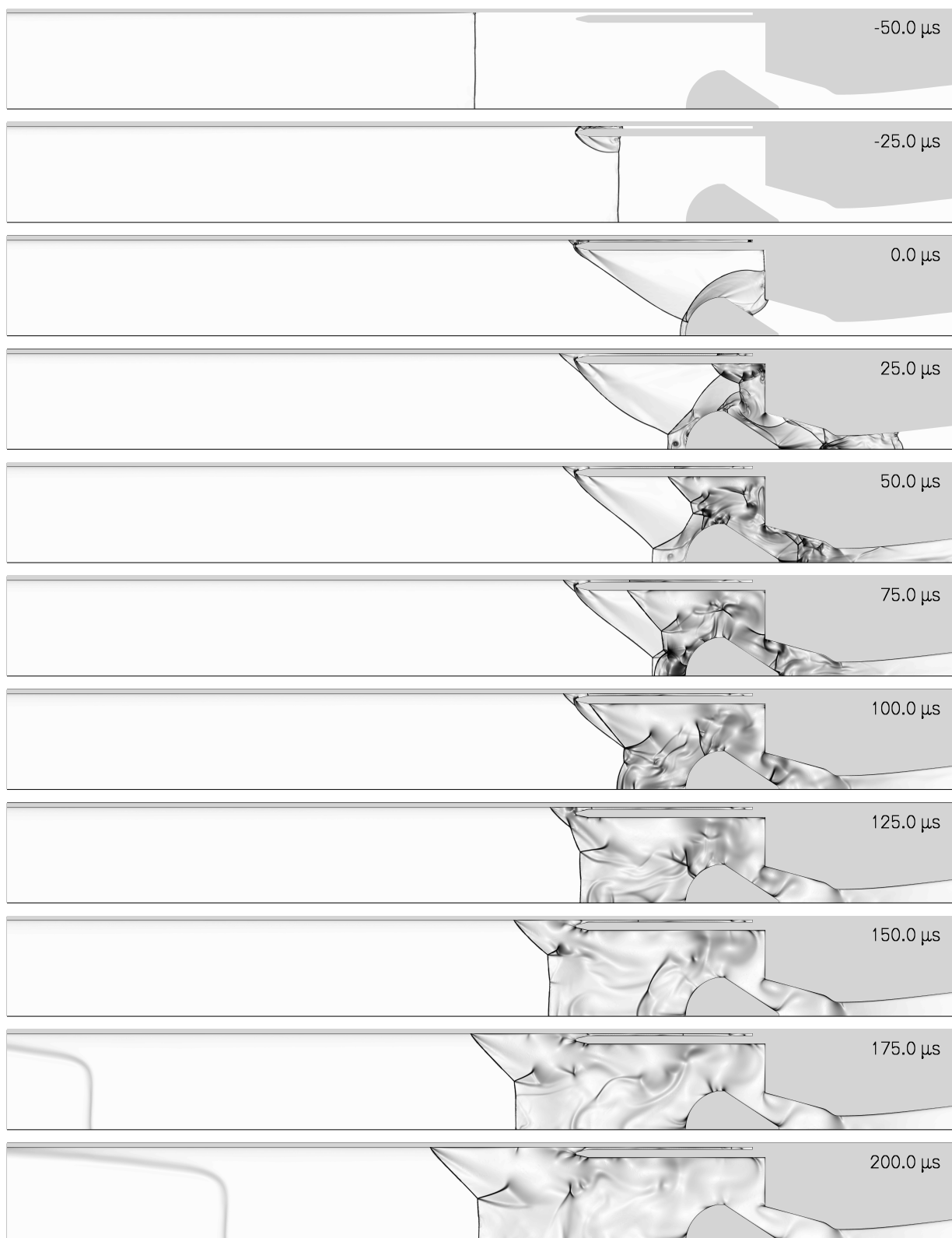


Abbildung 5.9: Rekonstruierte Schlierenbilder der berechneten Stoßrohrströmung im Hochenthalpiekanal Göttingen (Teil 1).

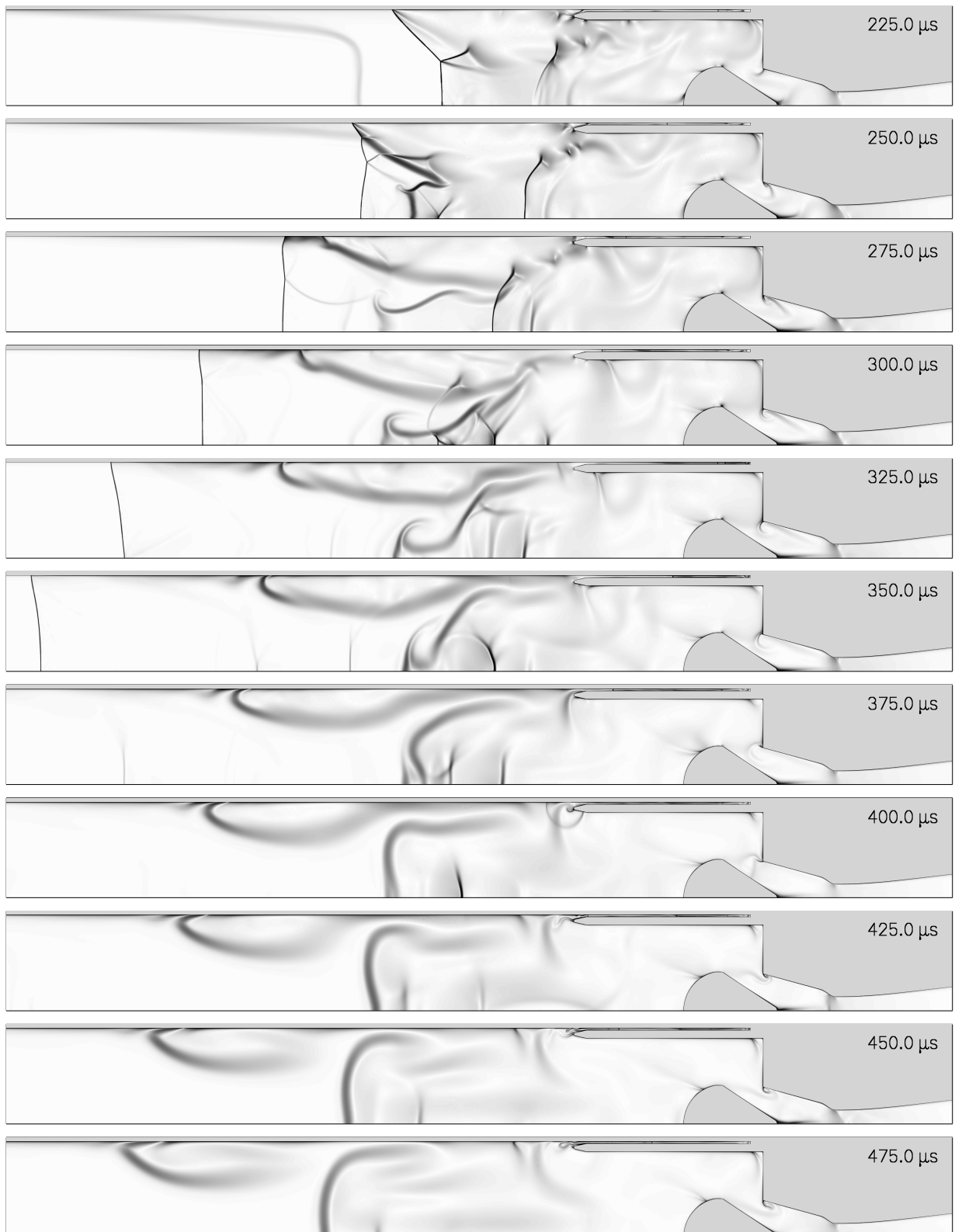


Abbildung 5.10: Rekonstruierte Schlierenbilder der berechneten Stoßrohrströmung im Hochenthalpiekanal Göttingen (Teil 2).

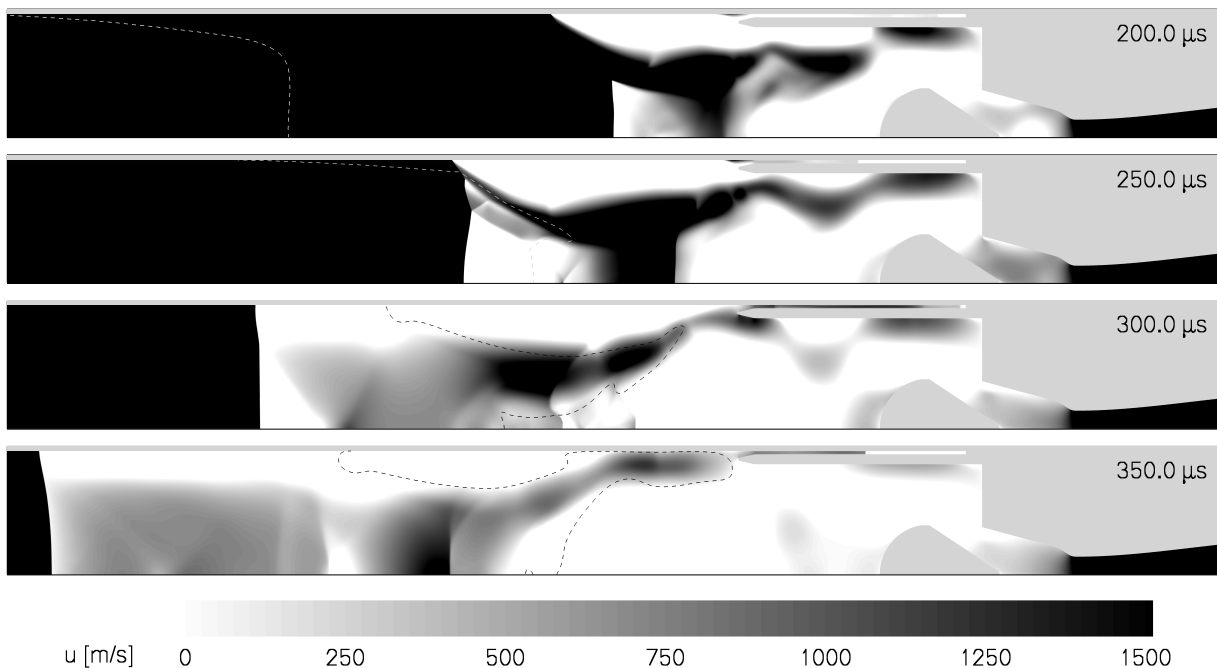


Abbildung 5.11: Zeitliche Entwicklung der x-Komponente der Strömungsgeschwindigkeit im Stoßrohr des Hochenthalpiekanals Göttingen. Die gestrichelte Linie entspricht einem Heliummassenanteil von 5%

für den Bereich des Heliumabscheiders finden sich im Anhang C.

Das erste Bild zeigt $50\ \mu\text{s}$ vor Stoßreflexion die senkrechte, einlaufende Stoßwelle. Die Stoßwelle beschleunigt und komprimiert das Testgas. Ausgehend vom Fußpunkt auf der Wand entwickelt sich die Wandgrenzschicht. $25\ \mu\text{s}$ vor Stoßreflexion ist der Stoß bereits über die Vorderkante des Heliumabscheiders gelaufen; die primäre Stoßwelle ist in den Spalt zwischen Abscheider und Stoßrohrwand eingetreten. Vor der Spitze des Abscheiders bildet sich eine abgelöste Kopfwelle, die unter mehrfacher Reflexion zwischen Stoßrohrwand und Abscheider in den Spalt hineinläuft. Die damit einhergehende Druckerhöhung führt zu einer Beschleunigung der primären Stoßwelle im Spalt. Zum Zeitpunkt der Stoßreflexion bei $0\ \mu\text{s}$ hat sich auch vor dem Partikelstopper eine abgelöste Kopfwelle entwickelt, die mit der vom Heliumabscheider ausgehenden Welle wechselwirkt. Der auf die Rohrwand treffende Stoß des Abscheiders führt zu einer Ablösung der Wandgrenzschicht. Vor dem sich entwickelnden Ablösegebiet bildet sich ein schräger Verdichtungsstoß, der sich stromab mit dem Stoß des Abscheiders vereinigt.

Da konstruktionsbedingt die Endwand im Spalt etwas vor der eigentlichen Stoßrohrwand liegt, reflektiert der primäre Stoß im Spalt früher. Nach $25\ \mu\text{s}$ läuft der von der Endwand reflektierte Stoß wieder stromauf. Das ankommende Grenzschichtgas kann den Drucksprung über den reflektierten Stoß nicht überwinden und löst ab. Vor dieser Ablöseblase bildet sich wieder ein schräger Verdichtungsstoß, der mit der Kopfwelle der Partikelstoppers interagiert. Es bildet sich ein komplexes System aus Stoß-Stoß Wechselwirkungen und Scherschichtinstabilitäten.

Der im Spalt reflektierte Stoß erreicht nach $100\ \mu\text{s}$ die Eintrittsöffnung und tritt aus dem Spalt aus. Kurz danach erreicht das von der Endwand reflektierte, stromauf laufende Stoßsystem die Spitze des Heliumabscheiders. Der um die Spitze laufende Stoß wird von der Stoßrohrseitenwand reflektiert (Abbildung C.2, $120\ \mu\text{s}$). Dies führt dazu, daß sich nach $125\ \mu\text{s}$ ein weiterer Stoß im Spalt in Richtung Endwand ausbreitet. Er wird am Ende reflektiert und tritt nach $325\ \mu\text{s}$ wieder aus dem Abscheider aus.

Der weiter stromauf laufende Teil des Schrägstoß vereinigt sich mit Stoß vor der Spitze des Abscheiders. Dieser Stoß läuft bis $225\ \mu\text{s}$ unter Bildung einer Stoßbifurkation aufgrund der erneut ablösenden Wandgrenzschicht im Stoßrohr stromauf. Die wachsende Ablöseblase verursacht dabei eine Verschiebung des Gabelungspunktes in Richtung der Achse des Rohres.

$175\ \mu\text{s}$ nach Stoßreflexion ist am linken Rand des dargestellten Ausschnitts die Kontaktfläche zwischen Treib- und Testgas zu erkennen. Aufgrund der Grenzschicht bleibt das Treibgas in Wandnähe gegenüber dem Treibgas in Rohrmitte zurück, was zur Ausbildung des parabelförmigen Profils der Mediengrenze führt.

Kurz nach Wechselwirkung des reflektierten Stoßes mit der Kontaktfläche ist $250\ \mu\text{s}$ nach Stoßreflexion der Beginn der Treibgasstrahlbildung zu erkennen. Die im Vergleich zum senkrechten Stoß höhere Strömungsgeschwindigkeit des Fluids hinter den beiden schrägen Stößen des Gabelstoßsystems führt zur Bildung eines Treibgasstrahls, der sich entlang der Seitenwand in Richtung Endwand ausbreitet. $275\ \mu\text{s}$ nach Stoßreflexion ist die reflektierte



Abbildung 5.12: Zeitliche Entwicklung der Treibgasverteilung im Stoßrohr des Hochenthalpiekanal Göttingen (Teil 1). Die gestrichelte Linie entspricht einem Heliummassenanteil von 5%



Abbildung 5.13: Zeitliche Entwicklung der Treibgasverteilung im Stoßrohr des Hochenthalpiekanals Göttingen (Teil 2). Die gestrichelte Linie entspricht einem Heliummassenanteil von 5%

Stoßwelle vollständig in das Treibgas (Helium) eingetreten. Aufgrund der höheren Schallgeschwindigkeit des Treibgases gegenüber der des Testgases wird eine höhere Ausbreitungsgeschwindigkeit des Stoßes beobachtet, außerdem verschwindet die, durch die Ablösung der Wandgrenzschicht hervorgerufene Stoßbifurkation. Dieser bereits von Strehlow und Cohen [50] beobachtete Effekt beruht auf der für monoatomare Gase geringeren Kompression über den reflektierten Stoß.

Kurz bevor das Treibgas in den Spalt des Heliumabscheiders strömt, tritt $400\ \mu\text{s}$ nach Stoßreflexion eine Stoßwelle aus dem Spalt aus. Das hinter dieser Stoßwelle ausströmende Testgas drängt das Treibgas in das Stoßrohr zurück. Ursache dieser weiteren aus dem Spalt austretenden Stoßwelle sind Druckschwankungen, die sich im Spalt zu einer Stoßwelle aufteilen.

Abbildung 5.11 zeigt zu verschiedenen Zeiten die x-Komponente der Strömungsgeschwindigkeit. In Graustufen ist der Bereich von 0 bis $1500\ \text{m/s}$ dargestellt. Die gestrichelte Linie zeigt die 5% Grenze des Treibgasmassenanteils. Während in den weiß dargestellten Bereichen sogar Rückströmung auftritt zeigen die dunklen Bereiche die hohe Restgeschwindigkeit stromab der Stoßbifurkation. Bevor sich ab $250\ \mu\text{s}$ Treibgas entlang dieses Strahls ausbreitet erreicht kälteres Testgas die Stoßrohrendwand.

Einen besseren Überblick über den Prozess der Treibgasausbreitung gibt die Darstellung der Treibgasverteilung in den Abbildungen 5.12 und 5.13. Der dargestellte Bereich und die Zeitpunkte entsprechen den Schlierenbildern in den Abbildungen 5.9 und 5.10. Schwarz dargestellte Bereiche entsprechen einem Treibgasmassenanteil von 100%, weiße Bereiche einem Anteil von 0%. Die gestrichelte Linie entspricht einem Heliummassenanteil von 5%. Deutlich ist das parabelförmige Profil des einströmenden Heliums zu erkennen. Nach

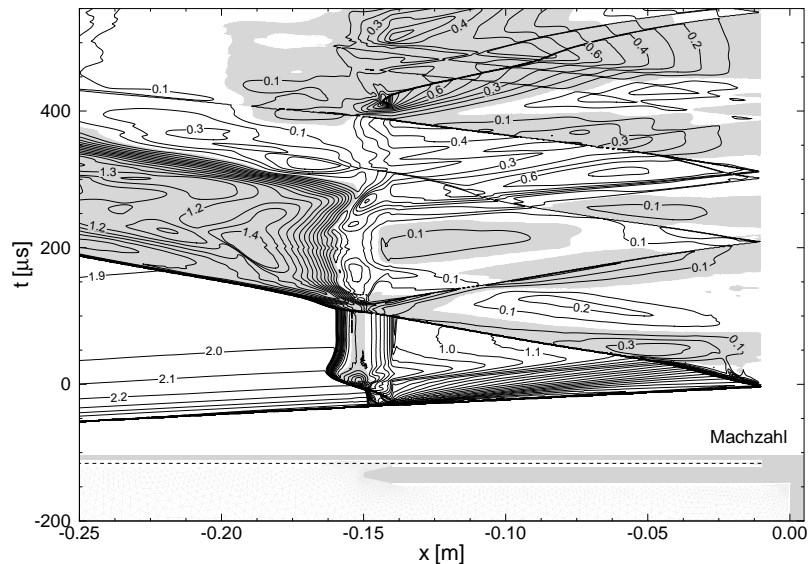


Abbildung 5.14: Weg-Zeit Diagramm der Strömung im Spalt des Heliumabscheiders. Dargestellt sind Linien konstanter Machzahl der TAU Lösung auf einer Linie entlang der Spaltmitte. Bereiche mit negativer x-Komponente des Geschwindigkeitsvektors sind grau hinterlegt.

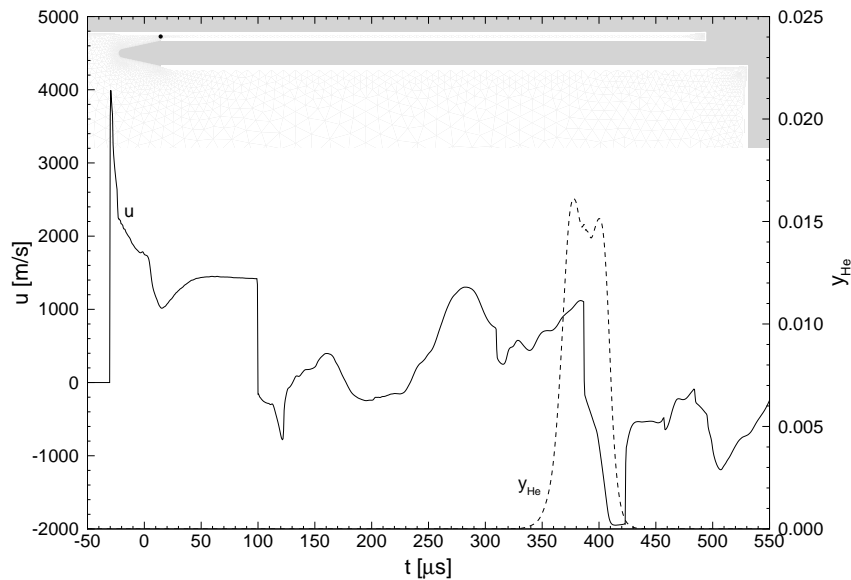


Abbildung 5.15: Strömung im vorderen Teil des Heliumabscheiders. Dargestellt ist die zeitliche Entwicklung der x-Komponente der Strömungsgeschwindigkeit und des Massenanteils des Treibgases.

der Wechselwirkung mit der reflektierten Stoßwelle beginnt ab $250\,\mu\text{s}$ die Bildung des Treibgasstrahls. Durch einen während des Reflexionprozesses im Reservoir entstandenen Stoß (Abbildung 5.10, $250\,\mu\text{s}$) wird der Strahl in Richtung Stoßrohrwand abgelenkt und breitet sich dann entlang dieser aus. Ab $400\,\mu\text{s}$ wird das Treibgas durch aus dem Spalt austretendes Testgas zurückgedrängt.

Abbildung 5.14 zeigt Machzahlisolinien im Weg-Zeit Diagramm in der Mitte des Spalts. Deutlich sind die im Spalt laufenden Wellen zu erkennen. Zusätzlich kennzeichnen die grauen Bereiche eine negative x-Komponente der Strömungsgeschwindigkeit. Nach Aus-treten der Stoßwelle aus dem Spalt des Abscheider bei ca. $400\,\mu\text{s}$ strömt kontinuierlich Gas aus. Die Abbildung 5.15 zeigt an dem im oberen Teil des Bildes dargestellten Punkt den zeitlichen Verlauf der x-Komponente der Strömungsgeschwindigkeit u und des Treib-gasmassenanteil y_{He} . Deutlich zu erkennen ist, daß sich die Strömungsgeschwindigkeit mit Durchlaufen der Stoßwelle ca. $400\,\mu\text{s}$ nach Stoßreflexion umkehrt, was zu einem Zurück-drängen der Kontaktfläche und somit zu einer Verringerung des Treibgasmassenanteils führt. Die Simulation zeigt eine bisher nicht in Betracht gezogene Wirkungsweise des Heli-umabscheiders. Anstatt, wie gedacht, das Treibgas in den Spalt zwischen Abscheider und Wand zu leiten wird die Treibgaskontamination durch Ausblasen von Testgas aus dem Spalt verzögert.

Wie bereits erläutert führt die Mehrfachreflexion des abgelösten Stoßes zwischen Stoß-rohrwand und Abscheider zu einer Druckerhöhung im Spalt. Abbildung 5.16 zeigt den Druckverlauf auf der Spitze des Heliumabscheiders. Die hohen Belastung des inneren Roh-res, führte insbesondere in der Entwicklungsphase zu einer plastischen Verformung der kompletten Vorrichtung. Abbildung 5.17 zeigt auf der linken Seite eine frühe Version des

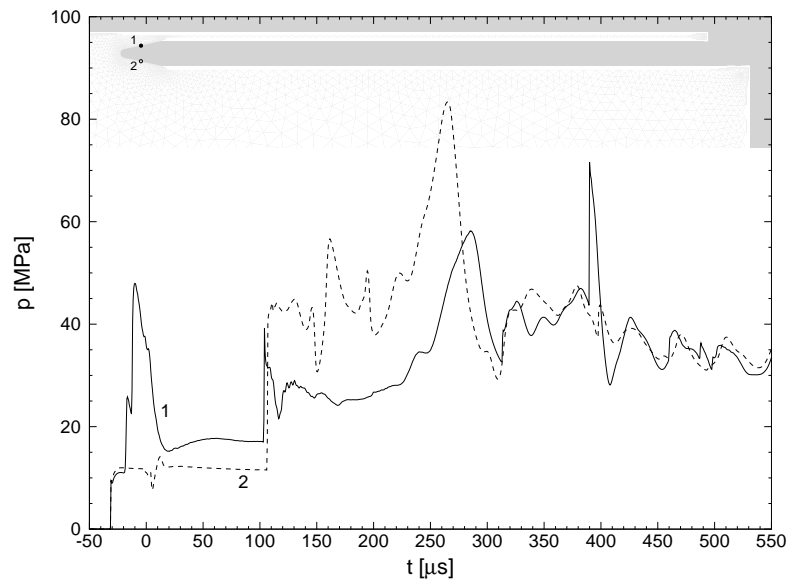


Abbildung 5.16: Zeitliche Entwicklung des Drucks auf der Vorderkante des Heliumabscheiders.

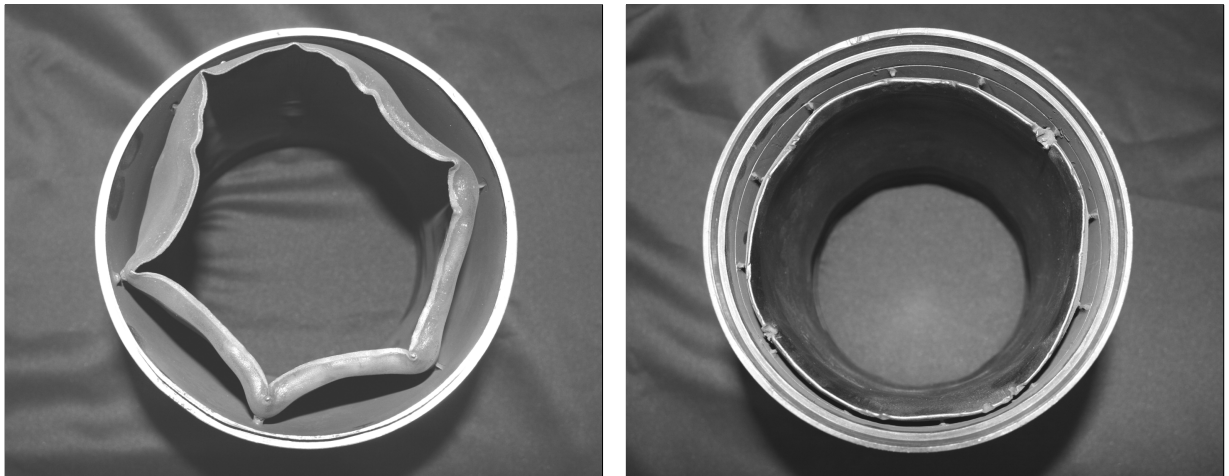


Abbildung 5.17: Fotografische Abbildung des Heliumabscheiders. Das linke Bild zeigt eine der ersten Versionen des Heliumabscheiders nach einem Versuch. Rechts ist die überarbeitete und verstärkte Version abgebildet, wie sie standardmäßig im HEG verwendet wird.

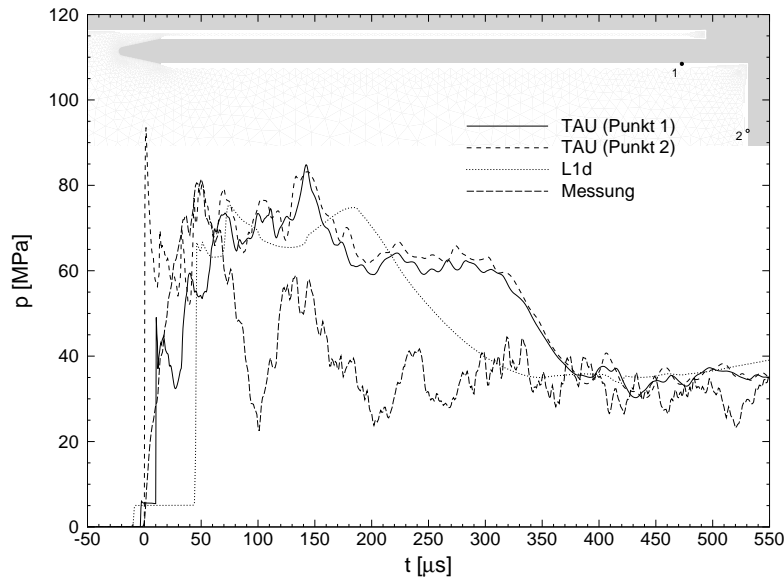


Abbildung 5.18: Zeitliche Entwicklung des Reservoirdrucks.

Heliumabscheiders, die während eines Versuchs im vorderen Bereich stark deformiert wurde. Mit der, auf der rechten Seite in Abbildung 5.17 gezeigten überarbeiteten Konstruktion, die standardmäßig bei Versuchsbedingung I im HEG verwendet wird, tritt eine derart starke Verformung nicht mehr auf. Um die Stabilität zu erhöhen, wurde die Anzahl der Verstrebungen, die das innere mit dem äußeren Rohr verbinden, verdoppelt. Außerdem wurde die Spitze des Abscheiders überarbeitet. Während die frühe Version nur eine Phase auf der Spaltseite hatte, hat die neuere Version eine symmetrische Spitze. Abbildung 5.18 zeigt einen Vergleich des mit TAU bzw. L1d berechneten mit dem im HEG gemessenen Reservoirdruck. Nach anfänglichen Schwankungen aufgrund des Reflexionprozesses stellt sich nach $400\ \mu\text{s}$ der erwartete Reservoirdruck von 35 MPa ein.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Zur Untersuchung heißer und kalter Hyperschallströmungen haben sich neben anderen Versuchsanlagen Stoßwellenrohre etabliert. Bei diesen Anlagen handelt es sich um Kurzzeitanlagen mit einer Meßzeit von nur wenigen Millisekunden. Ein Mechanismus, der diese Testzeit dramatisch verkürzt, ist die vorzeitige Treibgasankunft im Reservoir der Düse aufgrund einer Stoß-Grenzschicht Wechselwirkung mit anschließender Bildung eines wandnahen Treibgasstrahls. Die vorliegende Arbeit untersucht numerisch die Treibgaskontamination im Hochenthalpiekanal Göttingen (HEG). Von besonderem Interesse ist dabei die Wirkungsweise einer Vorrichtung zur Verzögerung der vorzeitigen Treibgaskontamination. Da das Stoßrohr aufgrund der extremen Bedingungen für Meßtechniken nicht ohne weiteres zugänglich ist, liegen nur beschränkt experimentelle Daten zur Wirkungsweise des sogenannten Treibgasabscheiders vor.

Mit dem DLR TAU-Code steht ein numerisches Verfahren zur Lösung der Navier-Stokes Gleichungen auf unstrukturierte Rechennetze zur Verfügung. Da das betrachtete Testgas im Stoßwellenrohr extremen Zustandsänderungen unterliegt, kann es nicht mehr als ideal betrachtet werden. Zunächst wurde ein Modell reagierende Gasgemische im thermischen und chemischen Gleichgewicht implementiert und validiert. Ein Vergleich mit dem bereits validierten und ebenfalls im DLR entwickelten CEVCATS-N Verfahren zeigt anhand von simulierten Kugel- und Zylinderumströmungen gute Übereinstimmung. Das im HEG verwendete Treibgas Helium wird als ideal betrachtet.

Die Simulation eines idealen Stoßwellenrohres mit verschiedenen Treib- und Testgasen zeigt, daß das Verfahren in der Lage ist Kontaktflächen und deren Bewegung richtig zu berechnen.

Als weiterer Validierungstest wurde die Wechselwirkung eines senkrechten Verdichtungsstoßes mit einer sich in Luft befindenden Helium- bzw. Difluorchlormethanblase zeitgenau simuliert. Um eine hohe räumliche Auflösung der bewegten Stoßwellen und Kontaktunestigkeiten zu erhalten, wurde das Rechennetz nach jedem Zeitschritt lokal adaptiert. Die Ergebnisse sind in sehr guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Außerdem zeigen sie die Fähigkeit mit Hilfe des Adaptionalgorithmus die gewisse Strömungstopologien instationär verfolgen zu können.

Für die Simulation der Strömung im Stoßrohr des HEG wurde die Möglichkeit der Simulation zweier getrennter Idealgase um die Kombination eines idealen und eines sich im thermochemischen Gleichgewicht befindlichen Gases erweitert. Die Anforderungen an räumliche und zeitliche Genauigkeit lassen eine Simulation der gesamten Anlage nicht zu. Aus diesem Grund beschränkt sich die Untersuchung auf den Reservoirbereich. Diese Einschränkung erfordert die Formulierung und Implementation einer Randbedingung, die es ermöglicht den Zustand und das Grenzschichtwachstum hinter der einströmenden Stoßwelle sowie der nachfolgenden Kontaktfläche vorzugeben.

Die Ergebnisse der HEG Simulation zeigen die erwartete Stoßbifurkation aufgrund des Ablösens der Stoßrohrgrenzschicht durch Interaktion mit der von der Endwand des Rohres reflektierten Stoßwelle. Aufgrund der höheren Strömungsgeschwindigkeit hinter den beiden Schrägstößen bildet sich nach Wechselwirkung mit der Kontaktfläche zwischen Treib- und Testgas ein Treibgasstrahl der vorzeitig das Düsenreservoir erreicht. Durch den Stoßreflexionsprozess laufen mehrfach Wellen in den Spalt des Treibgasabscheiders, die das Gas weiter komprimieren. Kurz vor Erreichen des Abscheiders wird das Treibgas durch aus dem Spalt der Vorrichtung austretendes Testgas zurückgedrängt. Die vorzeitige Kontamination des Reservoir mit Treibgas wird nicht wie erwartet durch ein Auffangen des Treibgasstrahl im Spalt des Abscheiders, sondern durch ein Unterdrücken der Strahlbildung durch aus dem Spalt austretendes Testgas erreicht.

Die gefundene Wirkungsweise des Heliumabscheiders hängt stark davon ab zu welchem Zeitpunkt der Treibgasstrahl den Heliumabscheider erreicht. Dieser Zeitpunkt hängt wiederum von der Position der Wechselwirkung zwischen reflektiertem Stoß und der Kontaktfläche sowie ihrer Form ab. Im Gegensatz zu der in der vorliegenden Arbeit gemachten idealisierten Annahme einer scharfen Treibgasfront wird sich in der Realität aufgrund des Öffnungsverhaltens der Hauptmembran eine Mischungszone zwischen Treib- und Testgas ergeben. Eine zukünftige Optimierung des Treibgasabscheiders in Länge und Spaltbreite erfordert somit auch eine detailliertere Betrachtung der Kontaktfläche.

Literatur

- [1] ALRUTZ, T.: *Investigation of the parallel performance of the unstructured DLR-TAU-Code on distributed computer systems*. In: DEAN, A. ET AL. (Herausgeber): *Theory and Applications*, Band 2005 der Reihe *Parallel Computational Fluid Dynamics*, Seiten 509–516, The Netherlands, 2006. Elsevier Publishing Co.
- [2] BARTH, T. J., JESPERSEN, D. C.: *The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes*. AIAA-89-0366, AIAA 27th AIAA Aerospace Sciences Meeting, Reno, 1989.
- [3] BOTTIN, B.: *Aerothermodynamic Model of an Inductively-Coupled Plasma Wind Tunnel*. Dissertation, Université de Liège, Liège, 1999.
- [4] BRENNER, G., RIEDELBAUCH, S., MÜLLER, B.: *The Computation of Axisymmetric Hypersonic Air Flows in Chemical Equilibrium. Part I: The Use of Curve-Fitting Routines*. Interner Bericht 221-89 A 09, Institut für Theoretische Strömungsmechanik, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., Göttingen, 1989.
- [5] BRÜCK, S.: *Ein Beitrag zur Wechselwirkung von Stößen in reaktiven Hyperschallströmungen*. Dissertation, Universität Stuttgart, Stuttgart, 1998.
- [6] CHUE, R. M. S., DUMITRESCU, M. P.: *Boundary layer suction device preliminary investigation*. In: HOUWING, A. F. P. (Herausgeber): *Proceedings of the 21st International Symposium on Shock Waves*, Great Keppel Island, 1997.
- [7] CHUE, R. M. S., EITELBERG G.: *Studies of the transient flows in high enthalpy shock tunnels*. Experiments in Fluids, 25:474–486, 1998.
- [8] DAVIES, L., WILSON, J. L.: *Influence of Reflected Shock and Boundary-Layer Interaction on Shock-Tube Flows*. In: EMRICH, R. J., LAPORTE, O., REICHENBACH, H. (Herausgeber): *High-Temperature and Short Duration Flows*, Band 12 der Reihe *The Physics of Fluids Supplement I*, Seiten 37–43, New York, 1969. American Institute of Physics.
- [9] DEUTSCHES ZENTRUM FÜR LUFT- UND RAUMFAHRT E.V.: *Technical Documentation of the DLR TAU-Code*, 2007.
- [10] DUMITRESCU, M.-P.: *Trapping the boundary layer: a method to diminish flow contamination in shock tunnels*. In: STURTEVANT, B. (Herausgeber): *Proceedings of the 20th International Symposium on Shock Waves*, Pasadena, 1996.

- [11] DWIGHT, R. P.: *Efficiency Improvements of RANS-Based Analysis and Optimization Using Implicit and Adjoint Methods on Unstructured Grids*. Dissertation, University of Manchester, Manchester, 2006.
- [12] EDWARDS, J. R., CHANDRA, S.: *Comparison of Eddy Viscosity-Transport Turbulence Models for Three-Dimensional, Shock-Separated Flowfields*. AIAA Journal, 34(4):756–763, 1996.
- [13] ESSER, B.: *Die Zustandsgrößen im Stoßwellenkanal als Ergebnisse eines exakten Riemannlösers*. Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule, Aachen, 1991.
- [14] GALLE, M.: *Ein Verfahren zur numerischen Simulation kompressibler, reibungsbefahelter Strömungen auf hybriden Netzen*. Forschungsbericht 99-04, Institut für Entwurfsaerodynamik, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., Braunschweig, 1999.
- [15] GOOZÉE, R. J., JACOBS, P. A., BUTTSWORTH, D. R.: *Simulation of a complete reflected shock tunnel showing a vortex mechanism for flow contamination*. Shock Waves, 13(3-4):165–176, 2006.
- [16] GUPTA, R. N., YOS, J. M., THOMPSON R. A., LEE K.-P.: *A Review of Reaction Rates and Thermodynamic and Transport Properties for an 11-Species Air Model for Chemical and Thermal Nonequilibrium Calculations to 30000 K*. Reference Publication 1232, National Aeronautics & Space Administration, 1990.
- [17] GURVICH, L. V., VEYTS, I. V., ALCOCK, C. B.: *Thermodynamic Properties of Individual Substances*. Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1989.
- [18] HAAS, J.-F., STURTEVANT, B.: *Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities*. Journal of Fluid Mechanics, 181:41–76, 1987.
- [19] HÄNEL, D., SCHWANE, R.: *An Implicit Flux-Vector Splitting Scheme for the Computation of Viscous Hypersonic Flows*. AIAA-89-0274, AIAA 27th AIAA Aerospace Sciences Meeting, Reno, 1989.
- [20] HANNEMANN, K., MARTINEZ SCHRAMM, J., KARL, S.: *Recent Extensions to the High Enthalpy Shock Tunnel (HEG)*. AA-3-2008-33, 2nd International ARA Days, Arcachon, 2008.
- [21] HANNEMANN, K., SCHNIEDER, M., REIMANN, B., MARTINEZ, J.: *The influence and the delay of driver gas contamination in HEG*. AIAA 2000-2593, 21st AIAA Aerodynamic Measurement Technology and Ground Testing Technology Conference, Denver, 2000.
- [22] JACOBS, P. A.: *Shock Tube Modelling with L1d*. Research Report 13/98, Department of Mechanical Engineering, The University of Queensland, Brisbane, 1998.

- [23] JACOBS, P. A., GARDNER, A. D.: *Gas-dynamic modelling of the HEG shock tunnel*. Interner Bericht 224-2003 A 02, Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., Göttingen, 2003.
- [24] JAMESON, A., SCHMIDT, W., TURKEL E.: *Numerical Solution of the Euler Equations by Finite Volume Methods Using Runge-Kutta Time-Stepping Schemes*. AIAA 81-1259, AIAA 14th Fluid and Plasma Dynamic Conference, Palo Alto, 1981.
- [25] LEER, B VAM: *Flux-vector splitting for the Euler equations*. Lecture Notes in Physics, 170:507–512, 1982.
- [26] LIOU, M.-S., STEFFEN, C. J.: *A New Flux Splitting Scheme*. Journal of Computational Physics, 107(1):23–39, 1993.
- [27] LIU, Y., VINOKUR, M.: *Equilibrium Gas Flow Computations. I. Accurate and Efficient Calculation of Equilibrium Gas Properties*. AIAA 89-1736, 24th AIAA Thermophysics Conference, Buffalo, 1989.
- [28] MACK, A.: *Analyse von heißen Hyperschallströmungen um Steuerklappen mit Fluid-Struktur Wechselwirkung*. Dissertation, Technische Universität Carolo-Wilhelmina, Braunschweig, 2005.
- [29] MACK, A., HANNEMANN, V.: *Validation of the Unstructured DLR-TAU-Code for Hypersonic Flows*. AIAA 2002-3111, 32th AIAA Fluid Dynamics Conference, St. Louis, 2002.
- [30] MARK, H.: *The interaction of a reflected shock wave with the boundary layer in a shock tube*. Technical Memorandum 1418, National Advisory Committee for Aeronautics, Washington, 1958.
- [31] MARTINEZ SCHRAMM, J.: *Aerothermodynamische Untersuchung einer Wiedereintrittskonfiguration und ihrer Komponenten in einem impulsbetriebenen Hochenthalpie-Stoßkanal*. Dissertation, Georg-August-Universität, Göttingen, 2008.
- [32] MARTINEZ SCHRAMM, J., BOUTRY, A., VITAL DURAND, M.: *Time Resolved Holographic Interferometry for Short Duration Hypersonic High Enthalpy Facilities*. In: *Proceedings of the 24th International Symposium on Shock Waves*, Beijing, 2004.
- [33] MIRELS, H.: *Boundary layer behind shock or thin expansion wave moving into stationary fluid*. Technical Note 3712, National Advisory Committee for Aeronautics, Washington, 1956.
- [34] MIRELS, H.: *Turbulent Boundary Layer Behind Constant Velocity Shock Including Wall Blowing Effects*. AIAA Journal, 22(8):1042–1047, 1984.
- [35] OERTEL, H.: *Stoßrohre*. Springer-Verlag, Wien, New York, 1966.

- [36] PETRIE-REPAR, P.: *Numerical Simulation of Diaphragm Rupture*. Dissertation, The University of Queensland, Brisbane, 1997.
- [37] PULLIN, D. I.: *Direct Simulation Methods for Compressible Inviscid Ideal-Gas Flow*. Journal of Computational Physics, 34(2):231–244, 1980.
- [38] QUIRK, J. J.: *A Contribution to the Great Riemann Solver Debate*. Int. Journal in Numerical Methods in Fluids, 18:555–574, 1994.
- [39] QUIRK, J. J., KARNI, S.: *On the dynamics of a shock-bubble interaction*. Journal of Fluid Mechanics, 318:129–163, 1996.
- [40] RADESPIEL, R., LONGO, J. M. A., BRÜCK, S., SCHWAMBORN, D.: *Efficient Numerical Simulation of Complex 3D Flows with Large Contrast*. Paper No. 32, 77th AGARD Fluid Dynamics Panel Meeting on Progress and Challenges in CFD Methods and Algorithms, Sevilla, 1995.
- [41] REIMANN, B.: *Zeitaufgelöste Strömungssichtbarmachung von Stoß-Stoß-Wechselwirkungen in Hochenthalpieströmungen*. Diplomarbeit, Georg-August-Universität, Göttingen, 2000.
- [42] REIMANN, B., HANNEMANN, V., HANNEMANN, K.: *Computations of shock wave propagation with local mesh adaptation*. In: HANNEMANN, K., SEILER, S. (Herausgeber): *Proceedings of the 26th International Symposium on Shock Waves*, Seiten 1383–1388, Berlin, 2007. Springer-Verlag.
- [43] REIMANN, B., JOHNSTON, I., HANNEMANN, V.: *DLR τ -Code for High Enthalpy Flows*. In: BREITSAMTER, C., LASCHKA, B., HEINEMANN, H.-J., HILBIG, R. (Herausgeber): *New Results in Numerical and Experimental Fluid Mechanics IV*, Band 87 der Reihe *Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design*, Seiten 99–106, Berlin, 2003. Springer.
- [44] ROE, P. L.: *Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes*. Journal of Computational Physics, 43(2):357–372, 1981.
- [45] ROSSOW, C.-C.: *A Flux Splitting for Compressible and Incompressible Flows*. Journal of Computational Physics, 164(1):104–122, 2000.
- [46] SCHWAMBORN, D., GERHOLD, T., HEINRICH, R.: *The DLR TAU-Code: Recent Applications in Research and Industry*. In: WESSELING, P., OÑATE, E., PÉRIAUX, J. (Herausgeber): *ECCOMAS CFD 2006*, The Netherlands, 2006. TU Delft.
- [47] SOD, G. A.: *A survey of Several Finite Difference Methods for Systems of Nonlinear Hyperbolic Conservation Laws*. Journal of Computational Physics, 27(1):1–31, 1978.
- [48] SPALART, P. R., ALLMARAS, S. R.: *A One-Equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows*. AIAA 92-0439, 30th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, Reno, 1992.

- [49] STALKER, R. J.: *A study of the free piston shock tunnel*. AIAA Journal, 12(5):2160–2165, 1967.
- [50] STREHLOW, R. A., COHEN A.: *Limitations of the Reflected Shock Technique for Studying Fast Chemical Reactions and Its Application to the Observation of Relaxation in Nitrogen and Oxygen*. Journal of Chemical Physics, 30(1):257–265, 1959.
- [51] SUDANI, N., HORNUNG, H. G.: *Detection and reduction of driver gas contamination in a high-enthalpy shock tunnel*. In: HOUWING, A. F. P. (Herausgeber): *Proceedings of the 21st International Symposium on Shock Waves*, Great Keppel Island, 1997.
- [52] SUDANI, N., WEILAND, M., HANNEMANN, K., ITHO, K.: *Gasdynamical Detector of Driver Gas Contamination in HEG*. In: LU, F. K. (Herausgeber): *Proceedings of the 23rd International Symposium on Shock Waves*, Fort Worth, 2001.
- [53] SUDANI, N., VALIFERDOWSKI, B., HORNUNG, H. G.: *Test Time Increase by Delaying Driver Gas Contamination for Reflected Shock Tunnels*. AIAA Journal, 38(9):1497–1503, 2000.
- [54] TAMURA, Y., FUJII K.: *Simulation of Experimental Visualization Methods for Computational Fluid Dynamics Research*. Int. Journal of Computational Fluid Dynamics, 2(3 & 4):309–333, 1994.
- [55] VINCENTI, W. G., KRUGER, C. H.: *Introduction to Physical Gas Dynamics*. Krieger Publishing Co., Malabar, 1986.
- [56] WADA, Y., LIOU M.-S.: *A Flux Splitting Scheme with High-Resolution and Robustness for Discontinuities*. AIAA 94-0083, 32nd Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, Reno, 1994.
- [57] WEBER, Y. S., ORAN, E. S., BORIS, J. P., ANDERSON, J. D.: *The numerical simulation of shock bifurcation near the end wall of a shock tube*. Physics of Fluids, 7(10):2475–2488, 1995.
- [58] WILCOX, D. C.: *Turbulence Modeling in CFD*. DCW Industries, Inc., La Cañada, 2006.
- [59] WILKE, C. R.: *A Viscosity Equation for Gas Mixtures*. Journal of Chemical Physics, 18(4):517–519, 1950.
- [60] WILSON, G. J., SHARMA, S. P., GILLESPIE, W. D.: *Time-Dependent Simulations of Reflected-Shock/Boundary Layer Interaction*. AIAA 93-0480, 31st Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, Reno, 1993.
- [61] ZIPPERER, L., HERNING, F.: *Beitrag zur Berechnung der Zähigkeit technischer Gasgemische aus den Zähigkeiten der Einzelbestandteile*. Das Gas- und Wasserfach, 4:49–, 1936.

Anhang

A Stoffkonstanten

A.1 Konstanten zur Berechnung thermodynamischer Größen

Tabelle A.1: Charakteristische Größen für molekulare Spezies.

Spezies	θ^0 [K]	σ	i	g_i	θ_i^{el} [K]	θ_i^{rot} [K]	θ_i^{vib} [K]	θ_i^{anh} [K]	θ_i^{k} [K]
N ₂	0	2	0	1	0	2,86	3392	20,42	0,0245
			1	3	72236	2,06	3101	19,98	0,0187
O ₂	0	2	0	3	0	2,08	2274	17,37	0,0227
			1	2	11392	2,05	2171	17,27	0,0246
			2	1	18985	2,01	2061	20,07	0,0262
			3	3	51934	1,31	1178	32,27	0,0203
NO	10801	1	0	2	0	2,45	2737	20,10	0,0256
			1	2	174	2,45	2737	20,10	0,0246
			2	8	55258	1,76	1466	18,42	0,0285
			3	2	63258	2,87	3411	20,86	0,0236

Tabelle A.2: Charakteristische Größen für atomare Spezies.

Spezies	θ^0 [K]	g_0	θ_0^{el} [K]	g_1	θ_1^{el} [K]	g_2	θ_2^{el} [K]	g_3	θ_3^{el} [K]	g_4	θ_4^{el} [K]
N	56654	4	0	10	27658	6	41495				
O	29696	5	0	3	228	1	326	5	22830	1	48620

A.2 Konstanten zur Berechnung der Viskosität

Tabelle A.3: Stoffkonstanten der Viskosität für den oberen Temperaturbereich.

Spezies	A_s^μ	B_s^μ	C_s^μ
N ₂	0,0203	0,4329	−11,8153
N	0,0120	0,5930	−12,3805
O ₂	0,0484	−0,1455	−8,9231
O	0,0205	0,4257	−11,5803
NO	0,0452	−0,0609	−9,4596

Tabelle A.4: Stoffkonstanten zur Berechnung der Viskosität der Spezies für den unteren Temperaturbereich.

Spezies	μ_s^0 [kg/(ms)]	S_s^μ [K]	$T_{0,s}^\mu$ [K]	$T_{g,s}^\mu$ [K]
N ₂	16,63	107,0	273	1282
N	44,76	120,0	1000	1000
O ₂	19,19	139,0	273	1111
O	47,06	120,0	1000	1000
NO	44,23	120,0	1000	1000

Tabelle A.5: Stoffkonstanten zur Berechnung der Viskosität nach Sutherland für den gesamten Temperaturbereich.

Spezies	μ_s^0 [kg/(ms)]	S_s^μ [K]	$T_{0,s}^\mu$ [K]
Luft	17,16	110,4	273
He	18,85	80,0	273

A.3 Konstanten zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit

Tabelle A.6: Stoffkonstanten der Wärmeleitfähigkeit für den oberen Temperaturbereich.

Spezies	A_s^κ	B_s^κ	C_s^κ	D_s^κ	E_s^κ
N ₂	0,03607	-1,07503	11,95029	-57,90063	93,21782
N	0,0	0,0	0,01619	0,55022	-12,92190
O ₂	0,07987	-2,58428	31,25959	-166,76267	321,69820
O	0,0	0,0	0,03310	0,22834	-11,58116
NO	0,02792	-0,87133	10,17967	-52,03466	88,67060

Tabelle A.7: Stoffkonstanten zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit der Spezies für den unteren Temperaturbereich.

Spezies	κ_s^0 [W/(mK)]	S_s^κ [K]	$T_{0,s}^\kappa$ [K]	$T_{g,s}^\kappa$ [K]
N ₂	0,0242	150	273	670
N	0,0242	150	273	0
O ₂	0,0244	240	273	1200
O	0,0244	240	273	0
NO	0,0241	194	273	810

B Bildliche Darstellung

B.1 Schlierenbilder

Zur Rekonstruktion eines Schlierenbildes aus numerischen Daten wird der Betrag des Gradienten der Gesamtdichte

$$|\nabla\rho| = \sqrt{\left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\rho}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\rho}{\partial z}\right)^2} . \quad (\text{B.1})$$

mit seinem Minimal- bzw. Maximalwert normiert

$$s = \frac{|\nabla\rho| - |\nabla\rho|_{\min}}{|\nabla\rho|_{\max} - |\nabla\rho|_{\min}} . \quad (\text{B.2})$$

Die sich ergebende GröÙe s liegt dann im Intervall $[0, 1]$. Mit Hilfe dieser GröÙe und den beiden Koeffizienten A und B wird der Grauwert g berechnet

$$g = B e^{-As} \quad B \in [0, 1], A \in [0, \infty) . \quad (\text{B.3})$$

Mit einem Bildverarbeitungsprogramm kann der Wert $g(x, y)$ in einer Graustufenverteilung im Intervall $[g_{\min}, g_{\max}]$ dargestellt werden. Die Verteilung ist so zu wählen, daß dem Wert g_{\min} schwarz und g_{\max} weiß entspricht.

Der Koeffizient A bestimmt dabei den Kontrast, B die Helligkeit des Bildes.

Es kommt vor, daß der Maximalwert des Betrages des Dichtegradienten an einer Position des Strömungsfeldes auftritt, der für die Visualisierung nicht von Interesse ist, z. B. wird der maximale Betrag des Gradienten für die HEG Strömung direkt an der kalten Wand ermittelt. Für diese Fälle ist es sinnvoll einen Wert kleiner $|\nabla\rho|_{\max}$ bei der Bestimmung von s zu verwenden.

Tamura und Fujii [54] geben einen Überblick über die Methoden der Strömungsvisualisierung und deren Anwendung auf numerische Daten.

C Strömung im Spalt des Treibgasabscheiders



Abbildung C.1: Strömung im Spalt des Heliumabscheiders (Teil 1).



Abbildung C.2: Strömung im Spalt des Heliumabscheiders (Teil 2).



Abbildung C.3: Strömung im Spalt des Heliumabscheiders (Teil 3).

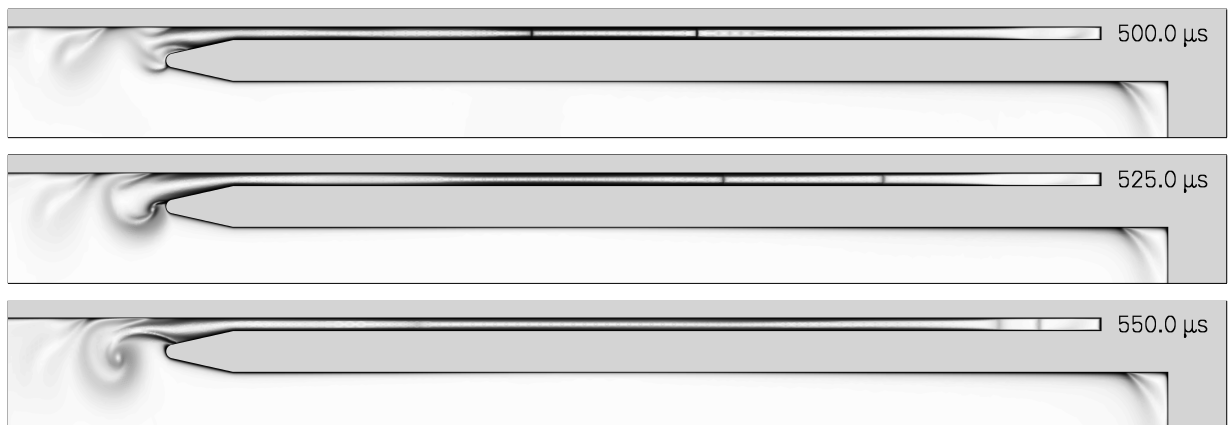


Abbildung C.4: Strömung im Spalt des Heliumabscheiders (Teil 4).

Lebenslauf

■ Persönliche Daten

Bodo Reimann

09. Juni 1972 in Stadtoldendorf geboren

verheiratet, 2 Kinder

■ Schule

1979–1983	Grundschule am Solling Deensen
1983–1985	Orientierungsstufe Stadtoldendorf
1985–1989	Homburg Realschule Stadtoldendorf
1989–1992	Fachgymnasium Technik Holzminden
Juli 1992	Abitur

■ Wehrdienst

1992–1993

■ Studium

1993–2000	Studium der Physik an der Universität Göttingen
Januar 2000	Diplomarbeit in experimenteller Strömungsmechanik ausgezeichnet mit dem ZARM-Förderpreis 1999

■ Promotionstipendium

2000–2004	Doktorandenstipendium am Institut für Strömungsmechanik des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt e. V. (DLR) in Göttingen
-----------	---

■ Berufliche Tätigkeit

2004–2005	wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik des DLR in Göttingen
seit März 2005	wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Aerodynamik und Strömungstechnik des DLR in Braunschweig

Braunschweig, November 2009